



МОСКВА «НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
1979



# БИБЛИОТЕКА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Редактор серии  
Д. В. ШИРКОВ

П. ДИРАК

---

# ПРИНЦИПЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Перевод с четвертого  
английского издания

Ю. Н. ДЕМКОВА, Г. Ф. ДРУКАРЕВА

Под редакцией и с предисловием  
акад. В. А. ФОКА

ИЗДАНИЕ ВТОРОЕ

МОСКВА «НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
1979

22.314

Д 47

УДК 530.145

# THE PRINCIPLES OF QUANTUM MECHANICS

P. A. M. DIRAC

FOURTH EDITION

OXFORD

AT THE CLARENDON PRESS

1958

## LECTURES ON QUANTUM MECHANICS

PUBLISHED BY BELFER

GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE

Yeshiva University New York,  
1964

Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. Пер. с англ. — 2-е изд. перераб. и доп. — М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1979.

Книга П. А. М. Дирака давно и заслуженно пользуется всемирной известностью. В ней дается совершенно оригинальное, последовательно выдержанное построение квантовой механики, начиная с самых основ и кончая важными физическими приложениями. В книге разобрано с большим математическим изяществом много физических задач. Материал книги изложен исключительно ясно в весьма малом объеме. Второе издание русского перевода отличается от первого, вышедшего в 1960 г. под редакцией В. А. Фока, некоторыми редакционными изменениями и уточнениями текста.

Книга дополнена переводом работы П. Дирака «Лекции по квантовой механике», вышедшим в 1968 г.

Д 20402—142  
053(02)-79 134-79. 1704020000

© Наука. Главная редакция  
физико-математической  
литературы, перевод на русский язык,  
1979

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА СЕРИИ

Вторым томом «Библиотеки теоретической физики» мы предлагаем знаменитую книгу одного из крупнейших физиков нашего столетия. Первый вариант ее был создан в конце 20-х годов вскоре после завершения квантовой механики и непосредственно вслед за созданием автором релятивистской квантовой теории электрона.

Несмотря на такой солидный возраст, книга и по сей день представляет большую ценность как для специалистов, так и для студентов.

Русский перевод последнего четвертого английского издания вышел в 1960 г. под редакцией академика В. А. Фока. Настоящая публикация отличается от предыдущей рядом технических деталей. Терминология приближена к оригиналу. Кроме того, в данном томе воспроизведен перевод работы Дирака «Лекции по квантовой механике», опубликованный в 1968 г. издательством «Мир». В этой небольшой по объему, но емкой по содержанию, книжке разработан вопрос о квантовании систем со связями, вопрос, который в последние годы приобрел актуальность в квантовой теории поля в связи с появлением неабелевых калибровочных полей (полей Янга—Миллса).

*Д. В. Ширков*

В марта 1979 г.

## ОТ РЕДАКТОРА РУССКОГО ИЗДАНИЯ

Книга П. А. М. Дирака «Принципы квантовой механики» давно и заслуженно пользуется всемирной известностью. Первое английское издание ее вышло в 1930 г. (русский перевод его в 1932 г.) последнее — четвертое — в 1958 г. В ней дано совершенно оригинальное, последовательно выдержанное построение квантовой механики, начиная с самых основ и кончая важными физическими приложениями. Если оставить в стороне первые четыре параграфа, то можно сказать, что автор строит теорию по методу «математической гипотезы»: сперва вводится математический аппарат (начиная с теории линейных операторов), а затем для него подыскивается физическое толкование. Блестящим примером применения метода математической гипотезы является открытая Дираком теория позитронов.

В книге разобрано с большим математическим изяществом много физических задач, причем некоторые из них впервые. Рассмотрена не только задача одного тела, включая электрон со спином и теорию столкновений, но и теория систем одинаковых частиц, описываемых симметричными и антисимметричными волновыми функциями. В конце книги излагается релятивистская теория электрона и позитрона и квантовая электродинамика, причем автор подробно останавливается и на затруднениях теории.

Глава о квантовой электродинамике заново написана автором для четвертого издания.

Однако необходимо указать и на недостатки книги. Едва ли можно согласиться с некоторыми философскими высказываниями Дирака (в частности, с теми, которые содержатся в его предисловии к первому английскому изданию). У читателя могут возникнуть также затруднения при чтении вводной части, составляющей начало гл. I, озаглавленной «Принцип суперпозиции». В первых четы-

рех параграфах этой главы сделана попытка ввести понятия квантового состояния и суперпозиции состояний раньше, чем дано определение для волновой функции. По нашему мнению, такое построение невозможно, и эти места книги (в особенности § 4) несомненно останутся для читателя непонятными. Само понятие состояния трактуется по всей книге так, как если бы оно принадлежало атомному объекту самому по себе, в отрыве от средств наблюдения. Такая абсолютизация понятия «квантовое состояние» приводит, как известно, к парадоксам. Эти парадоксы были разъяснены Нильсом Бором на основе представления о том, что необходимым посредником при изучении атомных объектов являются средства наблюдения (приборы), которые должны описываться классически.

Чтобы читатель мог восполнить имеющийся в книге Дирака пробел в физическом обосновании квантовой механики, можно рекомендовать ему чтение работ Бора «Дискуссии с Эйнштейном»\*) и «Квантовая физика и философия», напечатанных в журнале «Успехи физических наук»\*\*). Кроме того, по поводу некоторых утверждений Дирака редактором сделаны подстрочные примечания\*\*\*). В приложении дано отсутствующее в тексте исследование связи канонических преобразований классической и квантовой механики.

Несмотря на отмеченный здесь пробел, книга Дирака обладает огромными достоинствами, которые связаны, прежде всего, с цельностью точки зрения автора на квантовую механику и ее математический аппарат. В книге содержится очень большой материал, исключительно ясно изложенный в малом объеме. Эта сжатость книги является непревзойденной. Несомненно, что книга Дирака, хотя и написанная давно, надолго останется ценным пособием для всех изучающих квантовую механику.

В. Фок

---

\*) УФН, 1958, т. 66, с. 571; УФН, 1959, т. 67, с. 37.

\*\*) Взгляды В. А. Фока на физические основы квантовой теории изложены в его недавно переизданной книге «Начала квантовой механики» (Наука, 1976, гл. 1), явившейся в свое время (1932 г.) одним из первых оригинальных и систематических курсов по квантовой механике. (Прим. перев.).

\*\*\*) Главы I — V переведены Ю. Н. Демковым, а гл. VI—XI — Г. Ф. Друкаревым. О переводе введенных Дираком терминов см. подстрочное примечание на стр. 28.

## ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ АВТОРА К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

В этой книге делается упор на те принципы квантовой теории, которые, по моему мнению, являются наиболее надежными и, вероятнее всего, сохранятся при будущем развитии теории. Я не включил в книгу современную технику перенормировки, так как ее нельзя обосновать с той же степенью строгости, как остальную теорию, и она едва ли поэтому уцелеет.

Издание русского перевода моей книги радует меня тем, что оно свидетельствует о международном характере научной мысли и о единстве ученых всех наций.

Я одобряю сделанные редактором замечания в сносках и приложении в конце книги; то и другое имеет целью облегчить читателю понимание затруднительных мест.

15 октября 1959

*П. А. М. Дирак*

## ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Методы развития теоретической физики претерпели в этом столетии сильное изменение. Согласно классической традиции окружающий нас мир рассматривался как совокупность наблюдаемых объектов (частиц, флюидов, полей и т. п.), движущихся под действием сил согласно определенным законам, так что теория допускала наглядное представление в пространстве и времени. Это приводило к физике, задачей которой было делать предположения о механизме и силах, относящихся к этим наблюдаемым объектам, так, чтобы объяснить их поведение возможно более простым способом. Но в настоящее время становится все более очевидным, что природа действует иначе. Ее основные законы не управляют непосредственно миром наших наглядных представлений, но относятся к таким понятиям, о которых мы не можем составить себе наглядных представлений, не



впадая в противоречие. Формулировка этих законов требует применения математической теории преобразований, Величины, соответствующие важным понятиям в природе, являются инвариантами этих преобразований (или, в более общем случае, величинами, которые преобразуются по простым правилам). То, что мы непосредственно воспринимаем, есть отношения этих инвариантов к определенной системе отсчета, которая выбирается обычно так, чтобы добиться тех или иных специальных упрощений, несущественных для общей теории.

Возрастающее применение теории преобразований, которая была сначала применена в теории относительности, а затем в квантовой теории, представляет сущность нового метода в теоретической физике. Дальнейший прогресс состоит в том, чтобы делать наши уравнения инвариантными относительно все более широких классов преобразований. Такое положение вещей весьма удовлетворительно с философской точки зрения, так как оно указывает на все возрастающее признание роли наблюдателя в привнесении закономерностей в результаты своих наблюдений и на отсутствие произвола в природе, однако это делает изучение физики менее простым. Новые теории, независимо от их математической формы, построены на основе таких физических понятий, которые не могут быть объяснены с помощью известных ранее понятий, и даже не могут быть объяснены адекватно словами вообще. Подобно тем основным категориям, которыми каждый человек должен овладевать с рождения (например, понятия смежности, тождества), новые физические понятия можно освоить лишь при продолжительном знакомстве с их свойствами и их употреблением.

С математической стороны ознакомление с новыми теориями не представляет затруднений, так как нужные для этого отделы математики (по крайней мере те, которые были нужны для развития физики до настоящего времени), не отличаются существенно от тех, которые постоянно использовались уже долгое время. Математика есть орудие, специально приспособленное для овладения всякого рода абстрактными понятиями, и в этом отношении ее могущество беспредельно. По этой причине всякая книга по современной физике, если только она не ограничивается чистым описанием экспериментальных работ, должна быть существенно математической книгой. Тем не менее математика есть

лишь орудие, и нужно уметь владеть физическими идеями безотносительно к их математической форме. В этой книге я старался выдвинуть физику на передний план, начав изложение с чисто физической главы и в дальнейшем стараясь, где только возможно, исследовать физический смысл, лежащий в основе математического аппарата. Количество теоретического материала, который следует усвоить, прежде чем подойти к решению практических задач, довольно велико, но это обстоятельство является неизбежным следствием той роли, которую играет в данном случае теория преобразований, и оно будет, по-видимому, усугубляться в теоретической физике будущего.

Относительно математической формы, в которой может быть представлена теория, каждый автор вынужден выбирать с самого начала между двумя методами. Один из них — это символический метод, непосредственно оперирующий в абстрактной форме фундаментальными величинами теории; вторым же является метод координат или метод представлений, который оперирует с системами чисел, соответствующих этим величинам. Второй метод использовался обычно для изложения квантовой механики. Этот метод известен под одним из двух названий: «волновая механика» и «матричная механика» в зависимости от того, какие физические понятия выдвигаются на первый план — состояния системы или ее динамические переменные. Преимущество этого изложения заключается в том, что требуемые разделы математики более привычны, кроме того, именно этим путем шло историческое развитие квантовой механики.

Однако символический метод, по-видимому, глубже проникает в природу вещей. Он позволяет выразить физические законы в ясной и сжатой форме и, вероятно, будет применяться во все большей степени по мере того, как его будут больше понимать и будет развиваться соответствующий математический аппарат. По этой причине я выбрал символический метод, используя метод представлений лишь как средство для практических расчетов. Это неизбежно приводит к полному разрыву с исторической линией развития, но зато позволяет подойти к новым идеям возможно более прямым путем.

П. А. М. Д.

## ГЛАВА I

### ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ

#### § 1. Потребность в квантовой теории

Со времен Ньютона классическая механика непрерывно развивалась и применялась ко все более широкому кругу динамических систем, включая электромагнитное поле, взаимодействующее с материей. Основные идеи классической механики и законы, управляющие применением этих идей, образуют простую и изящную схему. Казалось бы, эта схема не может быть существенно улучшена без утраты всех ее привлекательных свойств. Тем не менее оказалось возможным ввести новую схему, названную квантовой механикой, которая более пригодна для описания явлений атомного масштаба и которая, в известном смысле, более изящна и удовлетворительна, чем классическая схема. Эта возможность возникла потому, что изменения, которые влечет за собой новая схема, носят весьма глубокий характер и не вступают в противоречие с теми свойствами классической теории, которые делают ее столь привлекательной; в результате все эти свойства можно включить в новую схему.

Необходимость в отходе от классической механики с очевидностью следует из экспериментальных данных. Прежде всего, силы, известные в классической электродинамике, непригодны для объяснения замечательной стабильности атомов и молекул, стабильности, которая необходима для того, чтобы вещества вообще могли иметь определенные физические и химические свойства. Введение новых гипотетических сил не спасает положения, так как существуют общие принципы классической механики, справедливые для всех видов сил, которые приводят к результатам, находящимся в прямом противоречии с опытом. Например, если нарушить каким-либо путем равновесие атомной системы,

а затем предоставить ее самой себе, то она начнет колебаться; колебания будут воздействовать на окружающее электромагнитное поле, так что частоты этой системы можно будет наблюдать с помощью спектроскопа. Каков бы ни был характер сил, определяющих равновесие, можно ожидать, что разнообразные частоты могут быть включены в схему, которая содержит некоторые фундаментальные частоты и их гармоники. Однако этого не наблюдается. На самом деле наблюдается новое и неожиданное соотношение между частотами — комбинационный принцип Ритца, согласно которому все частоты могут быть выражены как разности между некоторыми величинами — термами; число этих термов много меньше числа частот. Этот закон совершенно непонятен с классической точки зрения.

Можно было бы попытаться преодолеть эти трудности, не отказываясь от классической механики, предположив, что каждая из спектроскопически наблюдаемых частот есть фундаментальная частота со своей собственной степенью свободы, а законы сил таковы, что высшие гармоники отсутствуют. Однако такая теория неудовлетворительна: не говоря уже о том, что она не дает объяснения комбинационному принципу, она немедленно приводит к противоречию с экспериментальными данными об удельных теплоемкостях. Классическая статистическая механика позволяет установить общее соотношение между полным числом степеней свободы совокупности колеблющихся систем и ее удельной теплоемкостью. Если предположить, что все спектроскопические частоты атома соответствуют различным степеням свободы, то для удельной теплоемкости любого вещества получится величина гораздо больше наблюдаемой на опыте. На самом деле наблюдаемые удельные теплоемкости при обычных температурах получаются достаточно хорошо из теории, которая принимает во внимание лишь движение каждого атома как целого и не приписывает ему никакого внутреннего движения.

Это приводит нас к новому противоречию между классической механикой и результатами опыта. В атоме несомненно должно происходить внутреннее движение, что следует из самого существования атомного спектра; однако внутренние степени свободы по какой-то причине, необъяснимой с классической точки зрения, не вносят вклада в удельную теплоемкость. Аналогичное противоречие встречается

в связи с вопросом об энергии колебания электромагнитного поля в вакууме. Классическая механика требует, чтобы удельная теплоемкость, соответствующая этой энергии, была бесконечной. Из опыта же следует, что она конечна. Общий вывод, который следует из экспериментальных данных, заключается в том, что высокие частоты не вносят своего классического вклада в удельную теплоемкость.

В качестве другого примера неудачи классической механики рассмотрим поведение света. С одной стороны, мы имеем явления интерференции и дифракции, которые можно объяснить только с помощью волновой теории, с другой стороны — такие явления, как фотоэлектрический эффект и рассеяние света свободными электронами, которые показывают, что свет состоит из малых частиц. Каждая из этих частиц, называемых фотонами, имеет определенную энергию и импульс, зависящие от частоты света. Фотоны, по-видимому, столь же реально существуют, как электроны или любые другие известные в физике частицы. Дробная часть фотона никогда не наблюдалась.

Опыты показывают, что это аномальное поведение свойственно не только свету, а является весьма общим. Все материальные частицы обладают волновыми свойствами, которые могут проявляться в подходящих условиях. В данном случае мы имеем поразительный и общий пример крушения классической механики — крушения, которое заключается не просто в том, что законы движения оказались не точными, а в том, что *сами основные понятия классической механики оказались непригодными для описания атомных явлений.*

Необходимость отказа от классических идей для того, чтобы объяснить более детальное строение материи, можно увидеть не только из экспериментально установленных фактов, но также из общих философских соображений. В классическом объяснении природы вещества предполагается, что оно построено из большого числа малых составных частей и, постулируя законы поведения этих частей, можно вывести законы для вещества как целого. Однако это не есть полное объяснение, так как вопрос о природе и устойчивости составных частей остается при этом открытым. Для рассмотрения этого вопроса необходимо предположить, что каждая составная часть сама состоит из более мелких частей, поведение которых объясняет ее свойства. Очевидно, что это рассуждение можно продолжить до бесконечности,

так что таким путем невозможно дойти до последних составных частей вещества. До тех пор, пока *большое* и *малое* являются лишь относительными понятиями, невозможно объяснить большое с точки зрения малого. Поэтому необходимо изменить классические идеи таким путем, чтобы придать абсолютный смысл понятию размера.

На этом этапе важно вспомнить, что наука имеет дело лишь с наблюдаемыми вещами и что мы можем наблюдать объект, лишь заставляя его взаимодействовать с чем-нибудь внешним. Поэтому акт наблюдения неизбежно сопровождается известным возмущением наблюдаемого объекта. Мы можем назвать объект большим, если возмущением, сопровождающим наше наблюдение, можно пренебречь, и малым, если этим возмущением пренебречь нельзя. Это определение находится в тесной согласии с обычным представлением о большом и малом.

Обычно предполагается, что, соблюдая осторожность, можно уменьшить возмущение, сопровождающее наше наблюдение, до любого желаемого уровня. Понятия большого и малого при этом являются чисто относительными и в той же мере связаны с тонкостью наших средств наблюдения, как и с объектом, который мы описываем. Для того чтобы придать размерам абсолютный смысл, как того требует всякая теория наиболее мелких частиц вещества, следует допустить, что *существует предел тонкости наших средств наблюдения и малости сопровождающего возмущения — предел, который присущ природе вещей и никогда не может быть превзойден совершенствованием техники или искусства экспериментатора*. Если наблюдаемый объект таков, что неизбежным, ограничивающим нас возмущением можно пренебречь, тогда объект является большим в абсолютном смысле, и мы можем применять к нему классическую механику. Если же ограничивающим нас возмущением пренебречь нельзя — тогда объект мал в абсолютном смысле, и для того, чтобы его рассмотреть, нужна новая теория.

Из предыдущего рассуждения вытекает также, что следует пересмотреть наши представления о причинности. Условие причинности применимо лишь к системе, которая не подвергается возмущениям. Если система мала, то невозможно наблюдать ее, не внося существенного возмущения, и поэтому нельзя ожидать причинной связи между последовательными результатами наших наблюдений. Мы будем

по-прежнему предполагать, что условие причинности применимо к невозмущенной системе и что уравнения, описывающие эту систему, есть дифференциальные уравнения, выражающие причинную связь между обстоятельствами в начальный момент и обстоятельствами в последующие моменты времени. Эти уравнения должны находиться в тесном соответствии с уравнениями классической механики, однако они должны быть лишь косвенным образом связаны с результатами наблюдения. Существует неизбежная неопределенность в расчетах наблюдаемых величин; теория позволяет нам рассчитывать, вообще говоря, лишь вероятность того, что мы получим данный результат, если произведем наблюдение.

## § 2. Поляризация фотонов

Рассуждения предыдущего параграфа о пределе тонкости, с которой могут быть произведены наблюдения, и о соответствующей неопределенности в результатах этих наблюдений не дают нам еще количественной основы для построения квантовой механики. Для этого требуется новая система точных законов природы. Среди них одним из наиболее фундаментальных и радикальных является *принцип суперпозиции состояний*. Мы придем к общей формулировке этого принципа, рассмотрев несколько частных случаев — в первую очередь пример, связанный с поляризацией света.

Известно из опыта, что если линейно поляризованный свет использовать для вырывания фотоэлектронов, то вылетающие электроны будут иметь преимущественное направление. Таким образом, свойства поляризации света тесно связаны с его корпускулярными свойствами, и отдельному фотону можно приписать определенную поляризацию. Так, например, линейно поляризованный в некотором направлении пучок света можно рассматривать как состоящий из фотонов, каждый из которых линейно поляризован в том же направлении, а пучок света, поляризованный по кругу, — как состоящий из фотонов, поляризованных по кругу. Мы будем говорить, что каждый фотон находится в некотором *состоянии поляризации*. Теперь мы должны рассмотреть вопрос о том, как согласовать эти идеи с известными фактами о разложении света на поляризованные компоненты и об обратном сложении этих компонент.

Рассмотрим конкретную задачу. Пусть имеется пучок света, проходящий через кристалл турмалина, который обладает способностью пропускать только свет, поляризованный в направлении, перпендикулярном оптической оси кристалла. Из классической электродинамики известно, что будет происходить при той или иной поляризации падающего пучка. Если этот пучок поляризован перпендикулярно оптической оси, он полностью пройдет через кристалл; если параллельно оси, то вовсе не пройдет; если же он поляризован под углом  $\alpha$  к оси, то через кристалл пройдет часть пучка, равная  $\sin^2 \alpha$ . Как понять эти результаты, рассматривая свет как пучок фотонов?

Пучок света, линейно поляризованного в некотором направлении, следует рассматривать как состоящий из фотонов, каждый из которых линейно поляризован в этом направлении. Такое рассмотрение не вызывает затруднений в случае, если наш падающий пучок поляризован перпендикулярно или параллельно оптической оси. В этом случае нам достаточно лишь предположить, что каждый фотон, поляризованный перпендикулярно оси, проходит беспрепятственно и без изменений сквозь кристалл, в то время как каждый фотон, поляризованный параллельно оси, останавливается и поглощается. Трудность возникает, однако, в случае падающего пучка, поляризованного наклонно (под углом к оси). Каждый из падающих фотонов при этом поляризован наклонно, и неясно, что произойдет с таким фотоном, когда он достигнет турмалина.

Вопрос о том, что произойдет с отдельным фотоном в определенных условиях, на самом деле не является точно поставленным. Для того чтобы поставить его точнее, необходимо представить себе, что производится некоторый опыт, имеющий отношение к данному предмету, и задать вопрос, каков должен быть результат опыта. Только вопрос о результатах опытов имеет действительное значение, и лишь такие вопросы должна рассматривать теоретическая физика.

В нашем примере, очевидно, следует рассмотреть опыт, в котором падающий на кристалл с одной стороны пучок состоит лишь из одного фотона, и наблюдать, что произойдет на другой стороне кристалла. Согласно квантовой механике результат этого опыта будет тот, что иногда на обратной стороне будет обнаружен целый фотон с энергией, равной энергии падающего фотона, иногда же не будет обна-



ружено ничего. Если будет обнаружен целый фотон, он будет поляризован перпендикулярно оптической оси. Никогда на обратной стороне кристалла не будет обнаружена дробная часть фотона. Если повторить опыт большое число раз, то число случаев, в которых фотон будет обнаружен на обратной стороне, составит долю  $\sin^2 \alpha$  от общего числа опытов. Таким образом, мы можем сказать, что фотон с вероятностью  $\sin^2 \alpha$  может пройти через турмалин и появиться на обратной стороне кристалла, будучи поляризованным перпендикулярно оси, и с вероятностью  $\cos^2 \alpha$  может поглотиться. Эти значения для вероятностей приводят к правильным классическим результатам для падающего пучка, содержащего большое число фотонов.

Таким путем мы сохраняем индивидуальность фотона во всех случаях. Мы можем сделать это, однако, лишь потому, что мы отказались от детерминизма классической теории. Результат опыта не определен однозначно условиями, находящимися во власти экспериментатора, как должно было бы быть с точки зрения классических представлений. Самое большое, что может быть предсказано, это совокупность возможных результатов и вероятность появления каждого из них.

Приведенное рассуждение о результатах опыта с отдельным поляризованным под углом фотоном, падающим на кристалл турмалина, позволяет ответить на все законные вопросы о том, что произойдет с таким фотоном, когда он достигнет турмалина. Вопросы о том, как происходит выбор, пройдет ли фотон сквозь кристалл или нет и каким образом он меняет направление поляризации при прохождении — эти вопросы не могут быть решены опытным путем, и поэтому можно считать, что они лежат за пределами науки. Тем не менее, для того чтобы связать результаты этого опыта с результатами других опытов, которые могли бы быть произведены с фотонами, объединить их всех в общую схему, требуется более подробное описание. Такое описание не следует рассматривать как попытку ответить на вопросы, лежащие за пределами науки, а как вспомогательное средство для формулировки правил, выражающих в сжатой форме результаты многочисленных опытов.

Квантовая механика дает следующее более подробное описание. Предполагается, что фотон, поляризованный под углом к оптической оси, можно рассматривать как находя-

щийся частично в состоянии поляризации, параллельной оси, и частично в состоянии поляризации, перпендикулярной оси. Состояние поляризации под углом к оси можно рассматривать как результат какого-то процесса наложения, примененного к двум состояниям параллельной и перпендикулярной поляризации. Это приводит к некоторому, особого рода, соотношению между различными состояниями поляризации, похожему на соотношение между поляризованными пучками в классической оптике, которое, однако, применяется теперь не к пучкам, а к двум состояниям поляризации отдельного фотона. Это соотношение позволяет разложить каждое состояние поляризации на два взаимно перпендикулярных состояния поляризации, т. е. представить любое состояние как суперпозицию двух других.

Пропуская фотон через кристалл турмалина, мы подвергаем его наблюдению и устанавливаем, поляризован ли он параллельно или перпендикулярно оптической оси.

В результате этого наблюдения мы переводим фотон либо полностью в состояние параллельной поляризации, либо полностью в состояние перпендикулярной поляризации. Он должен сделать внезапный скачок от частичного пребывания в обоих этих состояниях к пребыванию целиком либо в одном, либо в другом из состояний; в котором из двух состояний произойдет скачок, невозможно предсказать однозначно: здесь действуют только вероятностные законы. Если произойдет скачок в параллельное состояние, фотон будет поглощен, если же скачок произойдет в перпендикулярное состояние, фотон пройдет сквозь кристалл и появится на обратной стороне, сохраняя это состояние поляризации.

### § 3. Интерференция фотонов

В этом параграфе мы рассмотрим другой пример суперпозиции (наложения). Мы будем по-прежнему иметь дело с фотонами, однако будем рассматривать их импульс и положение в пространстве, а не их поляризацию. Если мы имеем почти монохроматический пучок света, то нам уже кое-что известно о положении и импульсе связанных с этим пучком фотонов. Мы знаем, что каждый из них находится где-то в области пространства, через которую проходит пучок,

и обладает импульсом, который по направлению совпадает с направлением пучка, а по величине определяется частотой света согласно фотоэлектрическому закону Эйнштейна: импульс равен произведению частоты на универсальную постоянную. Если мы обладаем такими сведениями о положении и импульсе фотона, то мы будем говорить, что он находится в определенном *состоянии поступательного движения*.

Разберем теперь, как описывает квантовая механика интерференцию фотонов. Для этого рассмотрим следующий опыт, демонстрирующий интерференцию: пусть пучок света пропущен через некоторый интерферометр, так что пучок расщепляется на две компоненты, которые затем интерферируют друг с другом. Как и в предыдущем параграфе, мы можем взять падающий пучок, состоящий из одного фотона, и спросить, что произойдет, когда он пройдет через прибор. Это поставит перед нами во всей остроте вопрос о трудностях, связанных с противоречием между волновой и корпускулярной теорией света.

Соответственно тому описанию, которое мы приняли в случае поляризации, мы должны теперь, описывая поведение фотона, считать, что он войдет частично в каждую из двух компонент, на которые расщепился пучок. Мы можем тогда сказать, что фотон находится в состоянии поступательного движения, которое представляет собой суперпозицию двух состояний, соответствующих двум компонентам. Таким образом, мы приходим к обобщению понятия «состояния поступательного движения» в применении к фотону. Фотон, который находится в определенном состоянии поступательного движения, не обязательно связан с одним пучком света, а может быть связан с двумя или несколькими пучками, на которые расщепился исходный пучок \*). В точной математической теории каждое состояние поступательного движения связывается с некоторой волновой функцией обычной волновой оптики, а эти волновые функции могут описывать как отдельный пучок, так и два и более пучков. Состояния поступательного движения могут, таким

---

\*) То обстоятельство, что идея суперпозиции заставляет нас обобщить первоначальное понятие состояния поступательного движения, тогда как в предыдущем параграфе подобного обобщения для состояния поляризации не требовалось, является чисто случайным и не имеет глубокого теоретического смысла.

образом, налагаться одно на другое так же, как и волновые функции.

Рассмотрим теперь, что произойдет, если мы определим энергию одной из компонент. Результатом такого определения может быть либо целый фотон, либо ничего. Таким образом, фотон должен внезапно оказаться целиком в одном из пучков и перестать находиться отчасти в одном, а отчасти в другом пучке. Такое внезапное изменение вызвано тем возмущением в состоянии движения фотона, которое неизбежно вносит наблюдение. Невозможно предсказать, в каком из двух пучков будет найден фотон. Можно рассчитывать лишь вероятность каждого из результатов, зная первоначальное распределение фотона между двумя пучками.

Можно произвести измерение энергии, не уничтожая при этом составного пучка: например, можно отразить пучок от движущегося зеркала и измерить отдачу. Наше описание фотона позволяет сделать вывод, что *после* такого измерения энергии уже невозможно вызвать явления интерференции между обеими компонентами. До тех пор, пока фотон находится частично в одном, частично в другом пучке, интерференция при наложении пучков может возникнуть, но эта возможность исчезает, как только фотон переведен посредством измерения целиком в один из пучков. В этом случае второй пучок перестает участвовать в описании фотона, и следует считать, что он целиком находится в первом пучке, с которым в свою очередь, как обычно, можно произвести любой опыт.

Таким путем, квантовая механика способна примирить противоречия между корпускулярными и волновыми свойствами света. Существенным является то, что каждое состояние движения фотона связывается с некоторой волновой функцией обычной волновой оптики. Сущность этой связи не может быть описана на основе классической механики и является чем-то совершенно новым. Было бы совершенно неверно считать, что фотон и связанная с ним волна взаимодействуют между собой так же, как взаимодействуют частицы и волны в классической механике. Это соответствие можно толковать только статистически: волновая функция дает сведения о вероятности того, что при измерении положения фотона мы найдем его в том или ином месте.

Еще за некоторое время до открытия квантовой механики физикам стало ясно, что связь между световыми вол-

нами и фотонами должна иметь статистический характер. Однако они еще не вполне понимали того, что волновая функция дает сведения о вероятности нахождения *одного* фотона в данном месте, а не о вероятном числе фотонов в этом месте. То, что это различие является важным, видно из следующего рассуждения. Пусть мы имеем пучок света, состоящий из большого числа фотонов, который расщепляется на две компоненты одинаковой интенсивности. Сделав предположение о том, что интенсивность пучка связана с вероятным числом фотонов, мы получили бы, что в каждую из компонент попала бы половина от общего числа фотонов. Если далее эти две компоненты будут интерферировать, то мы должны потребовать, чтобы фотон из одной компоненты мог интерферировать с фотоном в другой компоненте. Иногда эти два фотона уничтожались бы, иногда же они превращались бы в четыре фотона. Это противоречило бы закону сохранения энергии. Новая теория, которая связывает волновую функцию с вероятностями для одного фотона, преодолевает эту трудность, считая, что каждый фотон входит отчасти в каждую из двух компонент. Тогда каждый фотон интерферирует лишь с самим собой. Интерференции между двумя разными фотонами никогда не происходит.

Рассмотренная выше связь между частицами и волнами относится не только к свету, а имеет, согласно современной теории, универсальный характер. Все виды частиц связаны с волнами и, наоборот, всякое волновое движение связано с частицами. Таким образом, все частицы могут интерферировать, и энергия всякого волнового движения имеет квантовый характер. Причина того, что эти общие явления не являются очевидными, заключена в законе о пропорциональности между массой или энергией частицы и частотой волны. Коэффициент пропорциональности в этом законе таков, что для волн обычных частот соответствующие кванты весьма малы, в то время как даже для таких легких частиц, как электроны, соответствующая частота волн столь велика, что обнаружить их интерференцию нелегко.

#### § 4. Суперпозиция и индетерминизм

Читатель, возможно, будет неудовлетворен сделанной в двух предыдущих параграфах попыткой согласовать существование фотонов с классической теорией света. Он мо-

жет возразить, что была введена весьма странная идея — возможность частичного нахождения фотона в обоих состояниях поляризации или в каждом из двух различных пучков света, причем даже с помощью этой странной идеи не было получено удовлетворительной картины для основных процессов, происходящих с одним фотоном. Он может сказать далее, что эта странная идея не позволяет получить новые сведения о результатах измерений в рассмотренной постановке опытов, сверх тех, которые могут быть получены из элементарного рассмотрения фотонов, поведение которых управляется каким-то неопределенным образом волнами. В чем же тогда польза этой странной идеи?

В ответ на первое возражение следует отметить, что главная задача физической науки состоит не в том, чтобы снабжать нас наглядными картинками, а в том, чтобы формулировать законы, управляющие явлениями, и использовать эти законы для открытия новых явлений. Если наглядная картина существует, то тем лучше; однако существует она или нет — это лишь второстепенный вопрос. В случае атомных явлений нельзя ожидать, что существует наглядная картина в обычном смысле этого слова, в котором под «наглядной» понимается модель, действующая в основном по классическим принципам. Можно, однако, расширить смысл слова «картина» так, чтобы включить в него любой *способ рассмотрения основных законов, при котором их взаимная согласованность становится очевидной*. В этом, более широком смысле слова, картина атомных явлений постепенно раскрывается по мере изучения законов квантовой теории.

Что касается второго возражения, то следует отметить, что для многих простых опытов со светом, элементарная теория, связывающая волны и фотоны каким-то статистическим способом, дает правильные результаты. В случае таких опытов квантовая механика не дает нам ничего нового. Однако в подавляющем большинстве опытов условия сложнее, элементарная теория такого рода неприменима, и требуется более разработанная схема, которую и дает квантовая механика. Способ описания, который дает квантовая механика в более сложных случаях, применим также и в простых случаях. И хотя в простых случаях этот способ описания не обязателен для объяснения экспериментальных результатов, тем не менее изучение его на этих простых

примерах может, пожалуй, служить хорошим введением к его изучению в общем случае.

Остается общее возражение, которое можно отнести ко всей схеме, которое заключается в том, что, отходя от детерминизма классической теории, мы сильно усложняем описание природы, а это является весьма нежелательным. Такое усложнение, конечно, имеет место, однако оно вполне окупается тем большим упрощением, которое вносит *принцип суперпозиции состояний*, к дальнейшему рассмотрению которого мы и перейдем. Однако до этого необходимо определить важное понятие «состояния» общей атомной системы.

Рассмотрим некоторую атомную систему, состоящую из частиц или тел с определенными известными нам свойствами (масса, момент инерции и т. п.); силы взаимодействия между частями этой системы также известны. Возможны различные движения, совместные с законами действия этих сил. Каждое из таких движений называется *состоянием* системы. Согласно классическим представлениям состояние системы можно определить, задавая численные значения всех координат и скоростей различных составных частей системы в некоторый момент времени, ибо тем самым будет полностью определено и все движение. Однако те доводы, которые приведены на стр. 14 и 15, показывают, что мы не можем наблюдать *малую* систему с той степенью подробности, которую предполагает классическая теория. Ограничение возможностей наблюдения приводит к ограничению числа данных, которыми характеризуется состояние. Таким образом, состояние атомной системы должно определяться не полным набором численных значений всех координат и скоростей в некоторый момент времени, а меньшим числом данных или же менее определенными данными. В случае, когда система состоит из одного фотона, состояние определяется полностью путем задания состояния поступательного движения (в смысле § 3) и состояния поляризации (в смысле § 2).

Состоянием системы может быть названо невозмущенное движение, которое ограничено таким количеством условий и данных, какое теоретически возможно задать без того, чтобы они друг другу мешали или противоречили. Практически эти условия могут быть заданы путем соответствующего приготовления системы, что может быть достигнуто, в частности, путем пропускания ее через различные типы сорти-

рующих приборов, таких, как щели и поляриметры, причем после приготовления дальнейшее вмешательство в движение системы прекращается. Под словом «состояние» можно понимать как состояние в определенный момент времени (после приготовления), так и состояние в течение всего времени после приготовления. В тех случаях, когда могут возникнуть недоразумения, мы, употребляя слово состояние во втором из указанных значений, будем говорить о «состоянии движения» \*).

Общий принцип суперпозиции квантовой механики применим к состояниям (в любом из указанных выше значений) произвольной динамической системы. Этот принцип заставляет нас принять, что между этими состояниями существуют особые соотношения — такие, что если система находится целиком в одном определенном состоянии, мы можем в то же время считать, что она находится отчасти в каждом из двух или нескольких других состояний. Первоначальное состояние следует считать результатом некоторой *суперпозиции (наложения)* двух или нескольких новых состояний, причем это наложение не может быть понято с классической точки зрения. Любое состояние можно рассматривать как результат суперпозиции двух или многих других состояний и притом бесконечным числом способов. Наоборот, любые два или несколько состояний могут быть наложены друг на друга и, тем самым, будет получено новое состояние. Представление состояния в виде результата суперпозиции некоторого числа других состояний — это математическая процедура, которая всегда возможна и не имеет отношения к физическим условиям. Эта процедура аналогична разложению волны на компоненты Фурье. Будет ли такое разложение полезно, это зависит от конкретных физических условий в рассматриваемой задаче.

В обоих предыдущих параграфах были приведены примеры применения принципа суперпозиции к системе, состоящей из одного фотона. В § 2 рассматривались состояния, отличающиеся лишь поляризацией, в § 3 — состояния, отличающиеся лишь поступательным движением фотона.

---

\*) Это определение фундаментального для квантовой механики понятия состояния не вполне удовлетворительно. Действительный смысл понятия «квантовое состояние» выяснится в дальнейшем при рассмотрении волновой функции и выражаемых через нее вероятностей, (Прим. В. А. Фока).



Природа вытекающего из принципа суперпозиции соотношения между состояниями любой системы такова, что ее нельзя объяснить в рамках привычных физических понятий. В классическом смысле слова нельзя представить себе, что система находится частично в одном состоянии, а частично в другом и что это эквивалентно тому, что система целиком находится в некотором третьем состоянии. Здесь вводится совершенно новая идея, к которой нужно привыкнуть и на основе которой следует далее строить точную математическую теорию, не имея при этом детальной классической картины.

Если состояние образовано путем суперпозиции двух других состояний, то оно будет иметь свойства, которые в некотором, несколько неопределенном смысле слова являются промежуточными между свойствами обоих исходных состояний и которые в большей или меньшей степени приближаются к свойствам одного из них, в зависимости от того, с большим или меньшим «весом» это состояние вошло в суперпозицию. Новое состояние будет полностью определено двумя исходными состояниями, если заданы их относительные веса, а также некоторая разность фаз; точный смысл этих весов и фаз в общем случае будет дан математической теорией. В случае поляризации фотона их смысл дается классической оптикой, так что, например, если происходит наложение с одинаковыми весами двух состояний линейно поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях, то новое состояние может быть поляризовано по кругу в любом направлении, или плоско поляризовано под углом  $1/4\pi$ , или же эллиптически поляризовано, в зависимости от разности фаз.

Неклассический характер процесса суперпозиции проявляется ясно, если мы рассмотрим суперпозицию двух состояний  $A$  и  $B$  — таких, что существует наблюдение, которое, будучи произведено над системой в состоянии  $A$ , наверняка приведет к некоторому определенному результату  $a$ , а будучи произведено над системой в состоянии  $B$ , наверняка приведет к какому-то иному результату  $b$ . Каков будет результат наблюдения в смешанном состоянии? Ответ на этот вопрос гласит, что результат будет иногда  $a$ , иногда  $b$ , в согласии с вероятностным законом, зависящим от относительных весов состояний  $A$  и  $B$  в смешанном состоянии. Результат измерения никогда не будет отличаться от  $a$  или  $b$ . Промежу-

*точный характер состояния, образованного в результате суперпозиции, выражается в том, что вероятность того или иного результата измерения будет промежуточной между соответствующими вероятностями для исходных состояний\*), а не в том, что сам результат будет промежуточным между соответствующими результатами для исходных состояний.*

Таким образом, мы видим, что отступление от обычных взглядов столь резкое, как допущение суперпозиционных связей между состояниями, становится возможным лишь в том случае, если мы признаем важность возмущений, сопровождающих наблюдения и связанную с ними неопределенность в результатах наблюдения. Если производятся наблюдения над атомной системой, которая находится в заданном состоянии, то результат, вообще говоря, не будет детерминированным, т. е., повторяя опыт при одинаковых условиях несколько раз, мы будем получать различные результаты. Однако законом природы является то, что если опыт повторять большое число раз, каждый результат будет получен в определенной доле от общего числа случаев, так что имеется определенная *вероятность* получения данного результата. Эту вероятность и будет вычислять теория. Лишь в тех частных случаях, когда вероятность некоторого результата равна единице, результат опыта однозначен.

Допущение суперпозиционных связей между состояниями приводит к математической теории, в которой уравнения, определяющие состояние, линейны по отношению к неизвестным. Ввиду этого многие пытались установить аналогию с системами классической механики, такими, как колеблющиеся струны или мембраны, которые подчиняются линейным уравнениям, а следовательно, и принципу суперпозиции. Эти аналогии привели к тому, что квантовую механику иногда называют «волновой механикой». Важно помнить, однако, что *суперпозиция, которая встречается в квантовой механике, существенным образом отличается*

---

\*) В общем случае, когда вероятности данного результата в исходных состояниях не равны 0 и 1, вероятность этого же результата в промежуточном состоянии, полученном в результате суперпозиции, не обязательно имеет промежуточное значение, так что «промежуточный характер» этого состояния следует понимать в ограниченном смысле. (Прим. В. А. Фока).

*от суперпозиции, встречающейся в любой классической теории.* Это видно из того факта, что квантовый принцип суперпозиции требует неопределенности результатов измерения, чтобы его было возможно разумно истолковать физически. Поэтому аналогии такого рода могут привести к ошибкам.

## § 5. Математическая формулировка принципа

В нашем столетии произошло глубокое изменение точки зрения физиков на математические основы их науки. Ранее они считали, что принципы механики Ньютона образуют основу описания всех физических явлений, и все, что оставалось физику-теоретику, — должным образом развивать и применять эти принципы. После осознания того, что не существует логических причин, почему ньютоновы и другие классические принципы применимы вне той области, в которой они экспериментально подтверждены, — стало ясно, что отклонения от этих принципов в самом деле неизбежны. Эти отклонения нашли свое выражение в том, что методы математической физики дополнились новыми формами математического аппарата, новыми системами аксиом и правил действия.

Квантовая механика дает нам яркий пример новых идей. Она требует, чтобы состояния динамической системы и динамические переменные были взаимосвязаны весьма странным образом, который непостижим с классической точки зрения. Состояния и динамические переменные должны характеризоваться математическими величинами другой природы, чем те, которые обычно используются в физике. Новая схема станет точной физической теорией; если будут перечислены все аксиомы и правила действия для математических величин и если, кроме того, будут установлены некоторые законы, связывающие физические факты с математическим аппаратом, так что если заданы физические условия, то могут быть выведены уравнения, связывающие математические величины, и обратно. Применение теории будет заключаться в том, что сначала заданные физические сведения следует выразить в виде уравнений между математическими величинами. Далее, используя аксиомы и правила действия, следует получить новые уравнения, и в заключение надлежит истолковать эти уравнения как некоторые физические условия. Подтверждение

всей схемы зависит, помимо ее внутренней непротиворечивости, от согласия окончательных результатов с опытом.

Мы начнем построение схемы с рассмотрения математических соотношений между состояниями динамической системы в определенный момент времени, соотношений, которые возникают в результате математической формулировки принципа суперпозиции. Процесс суперпозиции есть нечто вроде процесса сложения; это означает, что состояния можно как-то складывать, получая новые состояния. Поэтому состояния должны быть связаны с такими математическими величинами, которые можно складывать между собой, получая математические величины того же рода. Наиболее простыми и известными из таких величин являются векторы. Обычное представление о векторах в пространстве с конечным числом измерений не является достаточно общим для большинства систем в квантовой механике. Мы должны обобщить это понятие и перейти к векторам в пространстве бесконечного числа измерений; при этом математическое рассмотрение усложняется вопросом о сходимости. Однако сейчас мы будем рассматривать лишь некоторые общие свойства векторов, свойства, которые можно получить из простой системы аксиом; сходимость и связанные с ней вопросы не будут рассматриваться, пока в этом не возникнет необходимость.

Удобно иметь специальное обозначение для векторов, которые сопоставляются состояниям системы в квантовой механике независимо от того, будут ли это векторы в пространстве с конечным или бесконечным числом измерений. Мы будем называть их *кет-векторами* или просто *кет* \*) и в общем случае будем обозначать символом  $| \rangle$ . Если мы

---

\*) В первом издании перевода, по предложению редактора В. А. Фока, термины «кет-вектор» и вводимый далее «бра-вектор» были заменены соответственно на «вектор состояния» и «со-вектор состояния». В настоящее время термины «бра» и «кет» хотя и не стали общепринятыми, но все же нередко употребляются; поэтому мы решили в данном издании вернуться к этим обозначениям, представляющим собой первую и вторую половину английского слова bracket (скобка). В тех случаях, когда очевидно, какой из двух типов векторов имеется в виду, или же утверждение относится к обоим типам векторов, будет использоваться также термин *вектор состояния* или просто *вектор*. Следует различать значки  $(, )$  и  $|$  в обозначениях бра- и кет-векторов и других величин от знаков  $>, <$  и  $||$  (больше, меньше, знак модуля комплексного числа), которые также встречаются в книге, (Прим. перев.)

хотим снабдить кет-вектор состояния значком, например,  $A$ , то мы будем помещать его в середину —  $|A\rangle$ . Когда схема будет разработана, станет ясным удобство этого обозначения.

Кет-векторы можно умножать на комплексные числа и складывать между собой, получая другие кет-векторы, так, например, из двух кет-векторов  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$  можно образовать кет-вектор

$$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle = |R\rangle, \quad (1)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  — два комплексных числа.

Мы можем также приводить более общие линейные операции такие, как сложение бесконечной последовательности кет-векторов, а также, если мы имеем кет-вектор  $|x\rangle$ , который зависит от параметра  $x$  (и обозначаемый тем же параметром), принимающего все значения в некотором промежутке, то можно проинтегрировать по  $x$  и получить другой кет-вектор

$$\int |x\rangle dx = |Q\rangle.$$

Кет-вектор, который можно выразить в виде линейной комбинации других кет-векторов, называется *линейно зависящим* от них. Совокупность кет-векторов называется *линейно независимой*, если ни один из них не выражается в виде линейной комбинации остальных.

Предположим теперь, что *каждому состоянию динамической системы в определенный момент времени соответствует кет-вектор, причем это соответствие таково, что если состояние образовано в результате суперпозиции из некоторых других состояний, то кет-вектор этого состояния линейно выражается через соответствующие кет-векторы других состояний и обратно*. Таким образом, состояние  $R$  образовано в результате наложения состояний  $A$  и  $B$ , если только соответствующие кет-векторы связаны уравнением (1).

Сделанное выше предположение приводит к определенным свойствам процесса суперпозиции, свойствам, которые фактически необходимы для того, чтобы слово «суперпозиция» отражало суть дела. Если происходит суперпозиция двух или большего числа состояний, то порядок, в котором производится их суперпозиция, несуществен, так что процесс суперпозиции симметричен относительно

состояний, суперпозиция которых производится. Опять-таки из уравнения (1) мы видим, что (за исключением случая, когда  $c_1$  или  $c_2$  равны нулю), если состояние  $R$  может быть образовано наложением состояний  $A$  и  $B$ , то состояние  $A$  может быть образовано наложением  $B$  и  $R$ , и  $B$  может быть образовано наложением  $A$  и  $R$ . Соотношение суперпозиции между всеми тремя состояниями  $A$ ,  $B$  и  $R$  симметрично.

Состояние, которое получено в результате наложения некоторых других состояний, мы будем называть *линейно зависимым* от этих состояний. Более общо состояние будет называться *линейно зависимым* от некоторой (конечной или бесконечной) последовательности состояний, если соответствующий кет-вектор линейно зависит от кет-векторов состояний этой последовательности. Последовательность состояний будем называть *линейно независимой*, если ни одно из них не зависит линейно от остальных.

Развивая далее математическую формулировку принципа суперпозиции, мы должны ввести предположение, что, производя наложение некоторого состояния самого на себя, мы не можем получить никакое новое состояние — в результате такого наложения состояние не изменится. Если исходному состоянию соответствует кет-вектор  $|A\rangle$ , то полученному после суперпозиции состоянию будет соответствовать кет-вектор

$$c_1|A\rangle + c_2|A\rangle = (c_1 + c_2)|A\rangle,$$

где  $c_1$  и  $c_2$  — некоторые числа. Может случиться, что  $c_1 + c_2 = 0$ ; в этом частном случае результатом суперпозиции будет нуль, обе компоненты взаимно уничтожатся в результате интерференции. Наше новое допущение состоит в том, что, помимо этого частного случая, полученное состояние совпадает с исходным, так что кет-вектор  $(c_1 + c_2)|A\rangle$  соответствует тому же состоянию, что и кет-вектор  $|A\rangle$ . Но  $c_1 + c_2$  произвольное комплексное число, и, следовательно, мы можем заключить, что *если кет-вектор, соответствующий некоторому состоянию, умножить на любое неравное нулю комплексное число, то полученный кет-вектор будет соответствовать тому же состоянию*. Таким образом, состояние определяется лишь направлением кет-вектора, а длина, которую ему можно приписать, несущественна. Все состояния динамической системы находятся во взаимно однозначном соответствии с возможными

направлениями кет-векторов, причем не делается различия между направлениями кет-векторов  $|A\rangle$  и  $-|A\rangle$ .

Сделанное только что предположение показывает весьма ясно глубокое различие между суперпозицией в квантовой теории и какой бы то ни было классической суперпозицией. В случае классической системы, для которой справедлив принцип суперпозиции, например в случае колеблющейся мембраны, суперпозиция состояния с самим собой приводит к *другому* состоянию с другой амплитудой колебаний. В квантовом состоянии не существует физических характеристик, соответствующих амплитуде классических колебаний; аналогия с квантовым состоянием возможна только в отношении характера классического колебания, который определяется отношением амплитуд колебания в разных точках мембраны. Опять-таки, в классической механике существует состояние, в котором амплитуда колебаний повсюду равна нулю — состояние покоя, в то время как аналогичного состояния для квантовой системы не существует — нулевой кет-вектор соответствует отсутствию какого бы то ни было состояния вообще.

Если заданы два состояния, которым соответствуют кет-векторы  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$ , то общему состоянию, полученному в результате наложения, соответствует кет-вектор  $|R\rangle$ , который определяется двумя комплексными числами, а именно, коэффициентами  $c_1$  и  $c_2$  в уравнении (1). Если эти два коэффициента помножить на одинаковое число (тоже комплексное), то кет-вектор  $|R\rangle$  помножится на это число и соответствующее ему состояние не изменится. Таким образом, для определения состояния  $R$  существенно лишь отношение обоих коэффициентов. Следовательно, это состояние определяется одним комплексным числом или двумя вещественными параметрами. Таким образом, в результате суперпозиции из двух состояний может быть получена дважды бесконечная последовательность состояний.

Этот результат подтверждается примерами, рассмотренными в §§ 2 и 3. В примере из § 2 имелось как раз два независимых состояния поляризации фотона, за которые можно принять состояния линейной поляризации, параллельной и перпендикулярной некоторому фиксированному направлению. В результате суперпозиции этих двух состояний может быть получена дважды бесконечная последователь-

ность состояний эллиптической поляризации, для описания каждого из которых требуется задание двух параметров. Точно так же и в примере из § 3, в результате суперпозиции двух заданных состояний движения фотона может быть получена дважды бесконечная последовательность состояний движения, каждое из которых характеризуется двумя параметрами. В качестве таких параметров можно взять отношение амплитуд двух волновых функций, которые складываются между собой, и разность фаз между ними. Эти примеры подтверждают необходимость допущения комплексных коэффициентов в уравнении (1). Если бы мы допустили только вещественные коэффициенты, то, поскольку направление кет-вектора  $|R\rangle$  определяется лишь их отношением, в результате суперпозиции получили бы при заданных  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$  лишь простую (а не двойную) бесконечную последовательность состояний.

## § 6. Векторы бра и кет

Если в какой-либо математической теории встречается совокупность векторов, мы можем всегда ввести вторую совокупность векторов, которые математики называют дуальными векторами. Мы рассмотрим эту процедуру для случая, когда исходными векторами являются кет-векторы.

Пусть имеется число  $\phi$ , которое является функцией кет-вектора  $|A\rangle$ , т. е. каждому кет-вектору  $|A\rangle$  соответствует число  $\phi$ . Предположим далее, что эта функция линейна, т. е. что число, соответствующее сумме  $|A\rangle + |A'\rangle$ , есть сумма чисел, соответствующих  $|A\rangle$  и  $|A'\rangle$ , а число, соответствующее  $c|A\rangle$ , есть число, соответствующее  $|A\rangle$ , умноженное на  $c$ , где  $c$  — численный множитель. Тогда число  $\phi$ , соответствующее любому  $|A\rangle$ , можно рассматривать как скалярное произведение этого  $|A\rangle$  на некоторый новый вектор, причем каждой линейной функции от  $|A\rangle$  соответствует один из этих новых векторов. Такой способ рассмотрения функции  $\phi$  вводится потому, что, как мы увидим далее (см. уравнения (5) и (6)), новые векторы можно складывать между собой и умножать их на числа, получая снова векторы той же природы. Новые векторы, очевидно, определены лишь условием, что их скалярное произведение с исходными векторами дает заданные числа, однако этого уже достаточно



для того, чтобы построить математическую теорию подобных векторов.

Будем называть эти новые векторы *бра-векторами* или просто *бра* \*) и обозначим общий бра-вектор символом  $\langle |$ , который является зеркальным отображением соответствующего символа  $| \rangle$  для кет-вектора состояния. Если нужно снабдить бра-вектор значком, например  $B$ , мы будем помещать этот значок в середину, т. е. будем писать  $\langle B |$ . Скалярное произведение бра-вектора  $\langle B |$  и кет-вектора  $| A \rangle$  мы напомним в виде  $\langle B | A \rangle$ , т. е. поместим оба вектора рядом, кет-вектор справа, бра-вектор слева и для краткости объединим обе вертикальные черты в одну.

Символы  $\langle$  и  $\rangle$  можно рассматривать как особого рода скобки. Тогда скалярное произведение  $\langle B | A \rangle$  представляет собой полное скобочное выражение, а бра-вектор  $\langle B |$  или кет-вектор  $| A \rangle$  — неполные скобочные выражения. Мы получаем правило, что *полное скобочное выражение означает число, а неполное скобочное выражение означает вектор бра или кет в зависимости от того, содержит ли выражение первую или вторую часть скобок.*

Условие того, что скалярное произведение векторов  $\langle B |$  и  $| A \rangle$  есть линейная функция от  $| A \rangle$ , может быть выражено символически в виде

$$\langle B | \{ | A \rangle + | A' \rangle \} = \langle B | A \rangle + \langle B | A' \rangle, \quad (2)$$

$$\langle B | \{ c | A \rangle \} = c \langle B | A \rangle, \quad (3)$$

где  $c$  — любое число.

Можно считать, что бра-вектор определен полностью, если задано его скалярное произведение с любым кет-вектором. Так, например, если это скалярное произведение равно нулю, то следует считать, что и сам бра-вектор равен нулю. Символически:

$$\begin{aligned} &\text{если } \langle P | A \rangle = 0 \text{ для всех } | A \rangle, \\ \text{то} & \quad \langle P | = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Сумма двух бра-векторов  $\langle B |$  и  $\langle B' |$  определяется из условия, чтобы скалярное произведение суммы на любой

---

\*) См. примечание на стр. 28, (Прим. перев.)

кет-вектор  $|A\rangle$  было равно сумме скалярных произведений  $\langle B|$  и  $\langle B'|$  на  $|A\rangle$ , т. е.

$$\{\langle B| + \langle B'| \} |A\rangle = \langle B|A\rangle + \langle B'|A\rangle. \quad (5)$$

Произведение бра-вектора  $\langle B|$  на число  $c$  определяется из условия, чтобы скалярное произведение  $c \langle B|$  на любой кет-вектор  $|A\rangle$  было равно скалярному произведению  $\langle B|$  на  $|A\rangle$ , умноженному на  $c$ , т. е.

$$\{c \langle B| \} |A\rangle = c \langle B|A\rangle. \quad (6)$$

Уравнения (2) и (5) показывают, что произведение бра-вектора и кет-вектора удовлетворяет распределительному (дистрибутивному) закону умножения, а уравнения (3) и (6) показывают, что умножение на численные множители удовлетворяет обычным алгебраическим аксиомам.

Из данных здесь определений видно, что бра-векторы имеют совсем иную природу, чем кет, и до сих пор между ними не было никакой связи, за исключением возможности образования скалярного произведения для любого бра-вектора и кет-вектора. Сделаем теперь предположение о том, что *имеется взаимно однозначное соответствие между бра- и кет-векторами такое, что бра, соответствующий сумме  $|A\rangle + |A'\rangle$ , есть сумма бра, соответствующих  $|A\rangle$  и  $|A'\rangle$ , а бра, соответствующий  $c|A\rangle$ , равен бра, соответствующему  $|A\rangle$ , умноженному на  $\bar{c}$ , где  $\bar{c}$  есть число комплексно-сопряженное числу  $c$ . Мы будем использовать тот же значок для образования соответствующих векторов. Так, например, бра-вектор, соответствующий кет-вектору  $|A\rangle$ , будем обозначать  $\langle A|$ .*

Соотношение между кет-вектором и соответствующим бра-вектором таково, что имеет смысл считать один из них сопряженным другому. Наши бра- и кет-векторы являются комплексными величинами, так как их можно умножать на комплексные числа, после чего их природа не меняется, однако они являются комплексными величинами особого рода, которые не могут быть разбиты на чисто вещественную и чисто мнимую части. Обычный метод получения вещественной части комплексной величины путем вычисления полусуммы этой величины и ее сопряженной здесь неприменим, так как бра-векторы и кет-векторы имеют различную природу и их нельзя складывать. Для того чтобы подчеркнуть это различие, мы будем использовать

термин «комплексно-сопряженный» для чисел и других комплексных величин, которые могут быть разбиты на вещественную и чисто мнимую части, и термин «сопряженный» — для векторов состояния, которые нельзя разбить подобным образом. Для величин первого рода мы будем использовать обычное обозначение — переход к комплексно-сопряженной величине будет обозначаться чертой над соответствующим выражением.

Вследствие взаимно однозначного соответствия между бра-векторами и кет-векторами *любое состояние динамической системы в определенный момент времени может быть охарактеризовано как направлением бра-вектора состояния, так и направлением соответствующего кет-вектора.* Действительно, в дальнейшем вся теория будет по существу симметричной относительно бра- и кет-векторов.

Если даны два кет-вектора  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$ , то мы можем образовать из них число  $\langle B | A \rangle$ , взяв скалярное произведение первого на сопряженный второй. Это число зависит линейно от  $|A\rangle$  и *антилинейно* от  $|B\rangle$ , причем под антилинейной мы понимаем такую зависимость, при которой число, образованное из суммы  $|B\rangle + |B'\rangle$ , есть сумма чисел, образованных из  $|B\rangle$  и  $|B'\rangle$ , а число, образованное из произведения  $c |B\rangle$ , равно умноженному на  $c$  числу, образованному из  $|B\rangle$ . Величину, которая зависит линейно от  $|A\rangle$  и антилинейно от  $|B\rangle$ , можно построить и другим путем: взять комплексно-сопряженную величину от скалярного произведения кет-вектора  $|B\rangle$  и бра-вектора, сопряженного вектору  $|A\rangle$ . Мы предположим, что эти два числа всегда равны, т. е. что

$$\langle B | A \rangle = \overline{\langle A | B \rangle}. \quad (7)$$

Полагая здесь  $|B\rangle = |A\rangle$ , находим, что число  $\langle A | A \rangle$  должно быть вещественным. Предположим далее, что

$$\langle A | A \rangle > 0, \quad (8)$$

за исключением случая, когда  $|A\rangle = 0$ .

В обычном пространстве из двух векторов можно построить число — их скалярное произведение, которое вещественно и симметрично относительно обоих векторов. В пространстве бра-векторов или в пространстве кет-векторов из любых двух векторов можно также построить число — скалярное произведение одного на сопряженный

второй, но число это комплексное и переходит в комплексно-сопряженное число, если поменять местами оба вектора. В пространстве векторов состояния также имеет смысл понятие перпендикулярности, которое является обобщением перпендикулярности в обычном пространстве. Мы будем говорить, что бра- и кет-вектор *ортогональны*, если их скалярное произведение равно нулю; два бра-вектора или два кет-вектора ортогональны, если скалярное произведение одного на сопряженный второй равно нулю. Далее, мы будем говорить, что два состояния нашей динамической системы ортогональны, если ортогональны векторы, соответствующие этим состояниям.

Длина бра-вектора  $\langle A |$  или сопряженного кет-вектора  $| A \rangle$  определяется как квадратный корень из положительного числа  $\langle A | A \rangle$ . Если нам дано состояние системы и мы хотим ввести бра или кет, соответствующий этому состоянию, то будет определено только направление вектора — сам вектор будет определен лишь с точностью до произвольного численного множителя. Часто бывает удобно выбрать этот численный множитель так, чтобы длина вектора была равна единице. Эта процедура называется *нормировкой*, и выбранный таким образом вектор — *нормированным*. Вектор состояния не определен до конца даже в этом случае, так как мы все еще можем помножить его на число, равное по модулю единице, т. е. на любое число  $e^{i\gamma}$  с вещественным  $\gamma$ , не изменяя длины вектора. Мы будем называть такое число *фазовым множителем*.

Сделанные выше допущения дают полную схему соотношений между состояниями динамической системы в определенный момент времени. Эти соотношения имеют математический характер, однако они отображают определенные физические условия, приводящие к следствиям, которые могут быть выражены через наблюдаемые на опыте величины, как это будет видно из дальнейшего развития теории. Например, ортогональность двух состояний выражается пока лишь некоторым уравнением в нашем математическом аппарате, однако это уравнение отображает определенное физическое соотношение между этими состояниями, и дальнейшее развитие теории позволит истолковать это соотношение с точки зрения опытных данных (см. стр. 53, 54).

## ГЛАВА II

### ДИНАМИЧЕСКИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ И НАБЛЮДАЕМЫЕ

#### § 7. Линейные операторы

В предыдущем параграфе мы рассмотрели число, которое являлось линейной функцией от кет-вектора, и это привело нас к понятию бра-вектора. Рассмотрим теперь кет-вектор, который является линейной функцией кет-вектора. Это приведет нас к понятию линейного оператора.

Пусть мы имеем кет  $|F\rangle$ , который является функцией кет-вектора  $|A\rangle$ , т. е. каждому кет-вектору  $|A\rangle$  соответствует некоторый кет  $|F\rangle$ ; и пусть, кроме того, эта функция линейна, т. е. кет  $|F\rangle$ , соответствующий  $|A\rangle + |A'\rangle$ , есть сумма кет-векторов  $|F\rangle$ , соответствующих  $|A\rangle$  и  $|A'\rangle$ , а  $|F\rangle$ , соответствующий  $c|A\rangle$ , есть умноженный на  $c$  кет  $|F\rangle$ , соответствующий  $|A\rangle$ , где  $c$  — численный множитель. При этих условиях мы можем рассматривать переход от  $|A\rangle$  к  $|F\rangle$  как действие *линейного оператора* на кет-вектор  $|A\rangle$ . Вводя для линейного оператора символ  $\alpha$ , мы можем написать

$$|F\rangle = \alpha |A\rangle,$$

где действие оператора  $\alpha$  на  $|A\rangle$  записывается как произведение  $\alpha$  на  $|A\rangle$ . Введем правило, что в таком произведении *кет-вектор всегда должен быть расположен справа от линейного оператора*. Сформулированные выше условия линейности могут быть выражены тогда уравнениями

$$\begin{aligned} \alpha \{|A\rangle + |A'\rangle\} &= \alpha |A\rangle + \alpha |A'\rangle, \\ \alpha \{c|A\rangle\} &= c\alpha |A\rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

Можно считать, что линейный оператор полностью определен, если известен результат его действия на любой

кет-вектор. Так, например, оператор можно считать равным нулю, если результат действия его на любой кет есть нуль; два линейных оператора можно считать равными, если, действуя на одинаковые кет-векторы, они всегда дают одинаковые результаты.

Линейные операторы можно складывать, сумма двух линейных операторов есть, по определению, такой линейный оператор, который, действуя на любой кет, дает результат, равный сумме кет-векторов, полученных в результате действия каждого из двух слагаемых операторов на тот же кет. Таким образом, оператор  $\alpha + \beta$  определяется равенством

$$\{\alpha + \beta\} | A \rangle = \alpha | A \rangle + \beta | A \rangle \quad (2)$$

для любого  $| A \rangle$ . Уравнение (2) и первое из уравнений (1) показывают, что произведение линейных операторов на векторы подчиняется распределительному закону умножения.

Линейные операторы можно также перемножать; произведение двух линейных операторов есть по определению такой оператор, который, действуя на любой кет, дает такой же результат, как и последовательное действие этих двух операторов на этот кет-вектор. Таким образом, произведение  $\alpha\beta$  определяется как оператор, который, действуя на любой кет  $| A \rangle$ , переводит его в кет, который может быть получен, если на  $| A \rangle$  подействовать сначала оператором  $\beta$ , а затем на результат первой операции подействовать оператором  $\alpha$ . Символически:

$$\{\alpha\beta\} | A \rangle = \alpha \{\beta | A \rangle\}.$$

Это определение имеет вид сочетательного закона умножения для тройного произведения  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $| A \rangle$  и позволяет нам писать это произведение без скобок в виде  $\alpha\beta | A \rangle$ . Однако это тройное произведение, вообще говоря, отличается от того, которое мы получим, действуя на  $| A \rangle$  сначала оператором  $\alpha$ , а затем  $\beta$ , т. е., вообще говоря,  $\alpha\beta | A \rangle$  отличается от  $\beta\alpha | A \rangle$ , так что оператор  $\alpha\beta$  обычно отличается от  $\beta\alpha$ . Для линейных операторов коммутативный закон умножения не выполняется. Иногда может оказаться, что для двух линейных операторов  $\xi$  и  $\eta$  произведения  $\xi\eta$  и  $\eta\xi$  равны. В таком случае мы говорим, что  $\xi$  коммутирует с  $\eta$  или что  $\xi$  и  $\eta$  коммутативны.

Повторяя действия сложения и умножения, мы можем получать суммы и произведения более чем двух операторов. В этой алгебре не выполняется коммутативный закон умножения, кроме того, может быть равно нулю произведение двух отличных от нуля операторов. Однако легко доказать, что все остальные законы обычной алгебры, включая сочетательный и распределительный законы, выполняются.

Если взять число  $k$  и умножить на него кет-вектор, то это число можно рассматривать как линейный оператор, действующий на вектор, поскольку условия (1) выполняются после замены в них оператора  $\alpha$  на  $k$ . Число является, таким образом, частным случаем линейного оператора. Оно обладает тем свойством, что коммутирует со всеми линейными операторами, и это свойство отличает его от общего случая линейного оператора.

До сих пор мы рассматривали действие линейных операторов только на кет-векторы. Мы можем придать смысл их действию на бра-векторы следующим образом. Рассмотрим скалярное произведение бра  $\langle B |$  на кет  $\alpha | A \rangle$ . Это произведение есть число, которое линейно зависит от  $|A\rangle$  и, следовательно, согласно определению бра, это число можно рассматривать как произведение кет-вектора  $|A\rangle$  на некоторый бра-вектор. Определенный таким образом сопряженный бра-вектор зависит линейно от  $\langle B |$ , так что мы можем рассматривать его как результат действия некоторого линейного оператора на  $\langle B |$ . Этот линейный оператор однозначно определяется исходным линейным оператором  $\alpha$ , и поэтому естественно считать, что это тот же самый оператор, действующий на бра-вектор. Таким образом, наши линейные операторы могут теперь действовать и на бра-векторы.

Бра-вектор, полученный в результате действия оператора  $\alpha$  на  $\langle B |$ , удобно обозначить  $\langle B | \alpha$  так, что в этих обозначениях уравнение, определяющее  $\langle B | \alpha$ , имеет вид

$$\{\langle B | \alpha\} | A \rangle = \langle B | \{\alpha | A \rangle\}, \quad (3)$$

где  $|A\rangle$  — любой кет-вектор. Это уравнение выражает попросту сочетательный закон умножения для произведения  $\langle B |$ ,  $\alpha$  и  $|A\rangle$ . Поэтому мы введем общее правило, согласно которому в произведении бра-вектора и линейного оператора бра-вектор должен всегда стоять слева. Мы можем тогда писать тройное произведение  $\langle B |$ ,  $\alpha$  и  $|A\rangle$  просто

в виде  $\langle B | \alpha | A \rangle$  — без скобок. Легко показать, что распределительный закон умножения так же справедлив для произведения бра на операторы, как и для произведения операторов на кет-векторы.

Имеется еще один вид произведения, который имеет смысл в нашей схеме, а именно произведение кет-вектора и бра-вектора, в котором кет-вектор стоит слева, т. е.  $|A\rangle\langle B|$ . Чтобы исследовать это произведение, умножим его справа на произвольный кет  $|P\rangle$  и допустим, что выполняется сочетательный закон умножения. Произведение имеет тогда вид  $|A\rangle\langle B|P\rangle$  и является новым кет-вектором, а именно  $|A\rangle$ , умноженным на число  $\langle B|P\rangle$ , и этот новый кет зависит линейно от  $|P\rangle$ . Таким образом,  $|A\rangle\langle B|$  можно рассматривать как линейный оператор, который может действовать на кет-векторы. Он может действовать также и на бра-векторы; так, например, умножая  $|A\rangle\langle B|$  на бра  $\langle Q|$  слева, получим  $\langle Q|A\rangle\langle B|$ , т. е. умноженный на число  $\langle Q|A\rangle$ , бра  $\langle B|$ . Произведение  $|A\rangle\langle B|$  следует четко отличать от произведения  $\langle B|A\rangle$ , в котором те же множители стоят в обратном порядке, второе из этих произведений является, очевидно, числом.

Теперь мы имеем полную алгебраическую схему, в которой имеется три рода величин: бра-векторы, кет-векторы и линейные операторы. Их можно перемножать между собой различными способами, которые рассмотрены выше; сочетательный и распределительный законы умножения выполняются при этом всегда, коммутативный же закон умножения не выполняется. В этой общей схеме по-прежнему справедливы правила для обозначений, сформулированные в предыдущем параграфе, согласно которым полное скобочное выражение, содержащее  $\langle$  слева и  $\rangle$  справа, означает число, а неполное скобочное выражение, содержащее только  $\langle$  или  $\rangle$ , означает соответственно бра-вектор или кет-вектор.

Рассматривая физическое значение этой схемы, мы уже приняли, что бра-векторы или кет-векторы, или, точнее, направления этих векторов, соответствуют состояниям физической системы в определенный момент времени. Сделаем теперь дальнейшее предположение, что *линейные операторы соответствуют динамическим переменным в тот же момент времени*. Под динамическими переменными следует понимать такие величины, как координаты, компо-



ненты скорости, импульса или момента количества движения частиц, а также функции от этих величин, т. е. все те переменные величины, которые используются при построении классической механики. Из нового предположения следует, что эти величины должны встречаться также и в квантовой механике, однако характерной особенностью является то, что *теперь эти величины подчиняются алгебре, в которой не выполняется коммутативный закон умножения.*

Эта особая алгебра динамических переменных представляет собой одну из самых важных особенностей, отличающих квантовую механику от классической. Мы увидим далее, что, несмотря на это фундаментальное различие, динамические переменные квантовой механики и соответствующие классические величины все же обладают многими общими свойствами и что возможно построить теорию, находящуюся в тесной аналогии с классической теорией и являющуюся замечательным обобщением последней.

Удобно использовать одну и ту же букву для обозначения динамической переменной и соответствующего линейного оператора. Действительно, мы можем, не впадая при этом в противоречие, считать, что динамическая переменная и соответствующий линейный оператор — это одно и то же понятие.

## § 8. Соотношения сопряженности

Наши линейные операторы комплексны; это видно из того, что после умножения их на комплексные числа мы снова получаем линейные операторы, т. е. величины той же природы. Поэтому они должны, вообще говоря, соответствовать комплексным динамическим переменным, т. е. комплексным функциям от координат, скоростей и т. п. Для того чтобы увидеть, какие операторы соответствуют вещественным динамическим переменным, необходимо развить теорию несколько дальше.

Рассмотрим кет, сопряженный бра-вектору  $\langle P | \alpha$ . Этот кет зависит антилинейно от  $\langle P |$ , следовательно, линейно от  $| P \rangle$ , и его можно поэтому рассматривать как результат действия некоторого линейного оператора на  $| P \rangle$ . Этот оператор мы назовем *сопряженным* оператору  $\alpha$  и обозначим  $\bar{\alpha}$ . В этих обозначениях кет-вектором, сопряженным  $\langle P | \alpha$ , будет  $\bar{\alpha} | P \rangle$ . Подставим в формулу (7) гл. I  $\langle P | \alpha$  вместо

$\langle A |$  и сопряженный вектор  $\bar{\alpha} | P \rangle$  вместо  $| A \rangle$ . Тогда

$$\langle B | \bar{\alpha} | P \rangle = \overline{\langle P | \alpha | B \rangle}. \quad (4)$$

Эта общая формула справедлива для любых кет-векторов  $| B \rangle$  и  $| P \rangle$  и любого линейного оператора  $\alpha$ ; она выражает то свойство сопряженного оператора, которое чаще всего используется.

Подставляя в формулу (4)  $\bar{\alpha}$  вместо  $\alpha$ , получаем

$$\langle B | \bar{\bar{\alpha}} | P \rangle = \overline{\langle P | \bar{\alpha} | B \rangle} = \langle B | \alpha | P \rangle.$$

Здесь снова использована формула (4) с переставленными  $| P \rangle$  и  $| B \rangle$ . Формула справедлива для любого кет-вектора  $| P \rangle$ , и поэтому, согласно формуле (4) гл. I, имеем

$$\langle B | \bar{\bar{\alpha}} = \langle B | \alpha.$$

Поскольку, далее, эта формула справедлива для любого бра-вектора  $\langle B |$ , мы можем заключить, что

$$\bar{\bar{\alpha}} = \alpha.$$

Таким образом, *оператор, сопряженный сопряженному оператору, есть исходный линейный оператор*. Это свойство операции сопряжения делает ее похожим на комплексное сопряжение чисел; легко показать, что в том частном случае, когда линейный оператор есть число, сопряженным оператором будет комплексно-сопряженное число. Поэтому разумно предположить, что *сопряженному линейному оператору соответствует комплексно-сопряженная динамическая переменная*. Имея в виду этот физический смысл сопряженного оператора, мы можем называть его также комплексно-сопряженным оператором, что и соответствует нашему обозначению.

Если некоторый линейный оператор и сопряженный ему оператор совпадают, то мы будем называть такой оператор *самосопряженным*. Он соответствует вещественной динамической переменной, и поэтому его с таким же правом можно назвать *вещественным линейным оператором*. Любой линейный оператор может быть разбит на вещественную и чисто мнимую части. В этом отношении операторы скорее похожи на числа, и поэтому к ним применим также термин «комплексно-сопряженный», и непохожи на векторы состояния, для которых такое разбиение не имеет смысла,

Оператор, комплексно-сопряженный сумме двух линейных операторов, есть, очевидно, сумма соответствующих комплексно-сопряженных операторов. Чтобы получить оператор, комплексно-сопряженный произведению двух линейных операторов  $\alpha$  и  $\beta$ , воспользуемся формулой (7) гл. I, положив

$$\langle A | = \langle P | \alpha, \quad \langle B | = \langle Q | \beta,$$

так что

$$| A \rangle = \bar{\alpha} | P \rangle, \quad | B \rangle = \beta | Q \rangle.$$

Тогда, используя формулу (4), получаем

$$\langle Q | \beta \bar{\alpha} | P \rangle = \overline{\langle P | \alpha \beta | Q \rangle} = \langle Q | \overline{\alpha \beta} | P \rangle.$$

Поскольку формула справедлива для любых  $| P \rangle$  и  $| Q \rangle$ , из нее следует, что

$$\beta \bar{\alpha} = \overline{\alpha \beta}. \quad (5)$$

Таким образом, оператор, комплексно-сопряженный произведению двух линейных операторов, равен произведению комплексно-сопряженных операторов сомножителей, расположенных в обратном порядке.

Простым следствием этого результата является то, что если  $\xi$  и  $\eta$  вещественны, произведение  $\xi\eta$ , вообще говоря, не будет вещественным. Это — существенное отличие от классической механики. Однако  $\xi\eta + \eta\xi$ , а также  $i(\xi\eta - \eta\xi)$  вещественны. Произведение  $\xi\eta$  будет также вещественным, только если  $\xi$  и  $\eta$  коммутируют. Далее, если  $\xi$  вещественно, то вещественным будет  $\xi^2$ , а также  $\xi^n$ , где  $n$  — любое целое положительное число.

Мы можем получить оператор, комплексно-сопряженный произведению трех линейных операторов, применяя последовательно правило (5). Имеем

$$\overline{\alpha\beta\gamma} = \overline{\alpha(\beta\gamma)} = \overline{(\beta\gamma)} \bar{\alpha} = \bar{\gamma}\bar{\beta}\bar{\alpha}. \quad (6)$$

Таким образом, оператор, комплексно-сопряженный произведению трех линейных операторов, равен произведению комплексно-сопряженных операторов сомножителей, расположенных в обратном порядке. Это правило легко распространить на произведение любого числа операторов.

В предыдущем параграфе мы видели, что произведение  $| A \rangle \langle B |$  есть линейный оператор. Мы получим соответствующий комплексно-сопряженный оператор, обратив-

шись непосредственно к определению сопряженного оператора. Умножая  $|A\rangle\langle B|$  на произвольный бра-вектор  $\langle P|$ , получаем  $\langle P|A\rangle\langle B|$ ; соответствующим сопряженным кет-вектором будет

$$\overline{\langle P|A\rangle}\langle B| = \langle A|P\rangle\langle B| = |B\rangle\langle A|P\rangle.$$

Следовательно,

$$\overline{|A\rangle\langle B|} = |B\rangle\langle A|. \quad (7)$$

Теперь мы имеем ряд правил для образования сопряженных или комплексно-сопряженных произведений, а именно: уравнения (7) гл. I, уравнения (4), (5), (6), (7) этого параграфа а также правило, что кет-вектор, сопряженный бра-вектору  $\langle P|\alpha$ , есть  $\bar{\alpha}|P\rangle$ . Все эти правила можно свести к одному общему правилу: *если имеется произведение бра-векторов, кет-векторов и линейных операторов, то, чтобы получить сопряженное или комплексно-сопряженное выражение, нужно заменить все сомножители на сопряженные или комплексно-сопряженные и расположить их в обратном порядке*. Легко проверить, что это правило справедливо в самом общем случае, в частности, и во всех тех случаях, которые не были рассмотрены явно выше.

**Теорема.** Если  $\xi$  — вещественный линейный оператор и

$$\xi^m|P\rangle = 0 \quad (8)$$

для некоторого кет-вектора  $|P\rangle$ , где  $m$  — целое положительное число, то

$$\xi|P\rangle = 0.$$

Чтобы доказать эту теорему, рассмотрим сначала случай  $m = 2$ . Из уравнения (8) тогда следует

$$\langle P|\xi^2|P\rangle = 0,$$

а это значит, что произведение кет-вектора  $\xi|P\rangle$  на сопряженный ему бра-вектор  $\langle P|\xi$  есть нуль. Согласно предположению (8) гл. I отсюда следует, что  $\xi|P\rangle$  равно нулю. Таким образом, теорема доказана для случая  $m = 2$ .

Пусть теперь  $m > 2$ . Введем обозначение

$$\xi^{m-2}|P\rangle = |Q\rangle.$$

Тогда из уравнения (8) следует

$$\xi^2|Q\rangle = 0.$$

Применяя теорему для случая  $m = 2$ , получаем

$$\xi |Q\rangle = 0$$

или

$$\xi^{m-1} |P\rangle = 0. \quad (9)$$

Повторяя процесс, посредством которого получено уравнение (9), мы получим последовательно

$$\xi^{m-2} |P\rangle = 0, \quad \xi^{m-3} |P\rangle = 0, \quad \dots, \quad \xi^2 |P\rangle = 0, \quad \xi |P\rangle = 0$$

и, таким образом, теорема доказана для общего случая \*).

### § 9. Собственные значения и собственные векторы

Развивая далее теорию линейных операторов, мы должны исследовать уравнение

$$\alpha |P\rangle = a |P\rangle, \quad (10)$$

где  $\alpha$  — линейный оператор, а  $a$  — число. Обычно в этом уравнении  $\alpha$  — известный линейный оператор, а число  $a$  и кет  $|P\rangle$  неизвестны, и мы должны выбрать их так, чтобы удовлетворить уравнению (10) (тривиальное решение  $|P\rangle = 0$  не принимается во внимание).

Уравнение (10) означает, что оператор  $\alpha$ , действуя на  $|P\rangle$ , просто умножает этот вектор на численный множитель, не меняя его направления, или же умножает его на нуль, после чего вектор вообще перестает иметь направление. Тот же самый оператор  $\alpha$ , действуя на другие кет-векторы, будет, вообще говоря, менять как их длину, так и их направление. Следует отметить, что в уравнении (10) имеет значение только направление кет-вектора  $|P\rangle$ . Если  $|P\rangle$  удовлетворяет (или не удовлетворяет) уравнению (10), то после умножения на любое не равное нулю число он по-прежнему будет удовлетворять (или соответственно не удовлетворять) тому же уравнению.

Наряду с уравнением (10) нам следует рассмотреть также сопряженное уравнение

$$\langle Q | \alpha = b \langle Q |, \quad (11)$$

---

\*) Формулированная выше теорема верна, если все рассматриваемые векторы удовлетворяют граничным условиям, что подразумевается. (Прим. В. А. Фока.)

где  $b$  — число. Здесь неизвестными являются число  $b$  и не равный нулю бра-вектор  $\langle Q |$ . Уравнения (10) и (11) имеют настолько большое значение в теории, что желательно иметь специальные слова для описания отношений между величинами, входящими в уравнения. Если уравнение (10) удовлетворяется, мы будем называть  $a$  *собственным значением* \*) оператора  $\alpha$  (или соответствующей динамической переменной), а кет-вектор  $|P\rangle$  будем называть *собственным кет-вектором* линейного оператора или динамической переменной. Далее мы будем говорить, что «собственный кет-вектор  $|P\rangle$  относится к собственному значению  $a$ » или «собственный кет  $|P\rangle$  с собственным значением  $a$ ». Аналогично, если удовлетворяется уравнение (11), мы будем называть  $b$  собственным значением  $\alpha$ ;  $\langle Q |$  собственным бра-вектором, относящимся к этому собственному значению. Слова: «собственное значение», «собственный кет-вектор», «собственный бра-вектор» имеют, очевидно, смысл *лишь по отношению к определенному линейному оператору или динамической переменной*.

Используя эту терминологию, мы можем сказать, что если собственный вектор оператора  $\alpha$  умножить на любое не равное нулю число, то полученный вектор будет также собственным вектором и будет относиться к тому же собственному значению, что и исходный вектор. Может оказаться, что существует два или несколько линейно независимых собственных векторов линейного оператора, относящихся к одному и тому же собственному значению этого оператора; иначе говоря, уравнение (10) может иметь несколько решений  $|P_1\rangle, |P_2\rangle, |P_3\rangle, \dots$  при одном и том же значении  $a$ , причем различные собственные векторы  $|P_1\rangle, |P_2\rangle, |P_3\rangle, \dots$  — линейно независимы. В этом случае очевидно, что линейная комбинация этих собственных векторов также будет собственным вектором, относящимся к тому же собственному значению линейного оператора, т. е. решением уравнения (10) будет также вектор

$$c_1 |P_1\rangle + c_2 |P_2\rangle + c_3 |P_3\rangle + \dots,$$

где  $c_1, c_2, c_3, \dots$  — произвольные числа.

---

\*) Следует иметь в виду, что слова «собственный» и «несобственный» часто используются и в другом смысле. Так, например, в §§ 15 и 46 используются слова «несобственная функция» и «собственная энергия».

В частном случае, когда линейным оператором в уравнениях (10) и (11) является некоторое число  $k$ , очевидно, что любой кет  $|P\rangle$  или бра  $\langle Q|$  удовлетворяет этому уравнению, если положить  $a$  и  $b$  равными  $k$ . Таким образом, число, рассматриваемое как линейный оператор, имеет только одно собственное значение, любой кет есть собственный кет-вектор, любой бра есть собственный бра-вектор, и все они относятся к этому собственному значению.

В квантовой механике почти не используется теория собственных значений и собственных векторов для тех операторов, которые не являются вещественными. Поэтому мы, развивая теорию дальше, ограничимся лишь вещественными линейными операторами. Подставляя вместо произвольного линейного оператора  $\alpha$ , вещественный линейный оператор  $\xi$ , получаем вместо уравнений (10) и (11)

$$\xi|P\rangle = a|P\rangle, \quad (12)$$

$$\langle Q|\xi = b\langle Q|. \quad (13)$$

Легко получить три важных результата.

I. *Все собственные значения — вещественные числа.* Для доказательства того, что  $a$  в уравнении (12) вещественно, умножим (12) слева на бра  $\langle P|$ . Получаем

$$\langle P|\xi|P\rangle = a\langle P|P\rangle.$$

Далее, из уравнения (4), если в нем заменить  $\langle B|$  на  $\langle P|$ , а  $\alpha$  заменить вещественным оператором  $\xi$ , видно, что число  $\langle P|\xi|P\rangle$  должно быть вещественным. Из формулы (8) § 6 следует, что число  $\langle P|P\rangle$  вещественно и не равно нулю. Таким образом,  $a$  вещественно. Аналогично, умножая (13) на  $|Q\rangle$  справа, можно доказать, что  $b$  вещественно.

Пусть мы имеем решение уравнения (12). Напишем сопряженное уравнение, которое будет иметь вид

$$\langle P|\xi = a\langle P|$$

ввиду того, что  $\xi$  и  $a$  вещественны. Это сопряженное уравнение дает нам решение уравнения (13), если положить  $\langle Q| = \langle P|$  и  $b = a$ . Таким образом, мы можем утверждать далее:

II. *Собственные значения, соответствующие собственным кет-векторам, и собственные значения, соответствующие собственным бра-векторам, совпадают.*

III. Бра-вектор, сопряженный некоторому собственному кет-вектору, является собственным кет-вектором, относящимся к тому же самому собственному значению, и обратно. Из этого последнего результата следует, что естественно назвать состояние, которое соответствует собственному кет-вектору и собственному бра-вектору, *собственным состоянием* вещественной динамической переменной  $\xi$ .

Собственные значения и собственные векторы различных динамических переменных весьма широко используются в квантовой механике, так что желательно иметь для них систематические обозначения. Для большинства приложений удобна следующая схема. Если  $\xi$  — вещественная динамическая переменная, мы будем обозначать ее собственные значения  $\xi'$ ,  $\xi''$ ,  $\xi'$  и т. п. Таким образом, сама буква обозначает *вещественную динамическую переменную* или *вещественный линейный оператор*, а эта же самая буква со штрихом или с индексом означает *число*, а именно: собственное значение величины (оператора), которую обозначает буква. Собственный вектор можно теперь характеризовать тем собственным значением, к которому он относится. Таким образом,  $|\xi'\rangle$  означает собственный кет-вектор, относящийся к собственному значению  $\xi'$  динамической переменной  $\xi$ . В тех случаях, когда мы имеем дело с несколькими собственными векторами, относящимися к одному собственному значению динамической переменной, мы будем различать их дополнительным значком или даже несколькими значками. Так, например, если мы имеем дело с двумя собственными кет-векторами, относящимися к одному собственному значению  $\xi'$ , мы будем обозначать их  $|\xi'1\rangle$  и  $|\xi'2\rangle$ .

**Теорема.** Два собственных вектора вещественной динамической переменной, относящиеся к разным собственным значениям, ортогональны.

**Доказательство.** Пусть  $|\xi'\rangle$  и  $|\xi''\rangle$  — два собственных кет-вектора вещественной динамической переменной, относящиеся соответственно к собственным значениям  $\xi'$  и  $\xi''$ . Тогда мы имеем уравнения

$$\xi |\xi'\rangle = \xi' |\xi'\rangle, \quad (14)$$

$$\xi |\xi''\rangle = \xi'' |\xi''\rangle. \quad (15)$$



Возьмем уравнение, сопряженное уравнению (14),

$$\langle \xi' | \xi = \xi' \langle \xi' |.$$

Умножая это уравнение справа на  $|\xi''\rangle$ , имеем

$$\langle \xi' | \xi | \xi'' \rangle = \xi' \langle \xi' | \xi'' \rangle,$$

а умножая уравнение (15) на  $\langle \xi' |$  слева, имеем

$$\langle \xi' | \xi | \xi'' \rangle = \xi'' \langle \xi' | \xi'' \rangle.$$

Отсюда после вычитания

$$(\xi' - \xi'') \langle \xi' | \xi'' \rangle = 0, \quad (16)$$

и, таким образом, если  $\xi' \neq \xi''$ , то  $\langle \xi' | \xi'' \rangle = 0$ , т. е. собственные кет-векторы  $|\xi'\rangle$  и  $|\xi''\rangle$  ортогональны. Эту теорему мы будем в дальнейшем называть *теоремой ортогональности*.

Мы обсуждали свойства собственных значений и собственных векторов вещественного линейного оператора, однако еще не рассмотрен вопрос о том, существуют ли вообще для данного линейного оператора собственные значения и собственные векторы, а если и существуют, то как их найти. На этот вопрос, как правило, весьма трудно ответить. Имеется, однако, один полезный частный случай, который можно рассмотреть до конца, когда вещественный линейный оператор  $\xi$  удовлетворяет алгебраическому уравнению

$$\varphi(\xi) \equiv \xi^n + a_1 \xi^{n-1} + a_2 \xi^{n-2} + \dots + a_n = 0, \quad (17)$$

причем коэффициенты уравнения  $a$  — числа. Это уравнение означает, очевидно, что линейный оператор  $\varphi(\xi)$ , действуя на любой кет-вектор или бра-вектор, дает в результате нуль.

Пусть (17) есть простейшее алгебраическое уравнение, которому удовлетворяет  $\xi$ . Тогда можно показать следующее:

(α) число собственных значений  $\xi$  равно  $n$ ;

(β) имеется столько собственных кет-векторов оператора  $\xi$ , что любой кет всегда может быть представлен в виде суммы этих собственных кет-векторов.

Алгебраическое выражение  $\varphi(\xi)$  может быть представлено в виде произведения  $n$  сомножителей, линейных относительно  $\xi$ ,

$$\varphi(\xi) = (\xi - c_1)(\xi - c_2)(\xi - c_3) \dots (\xi - c_n), \quad (18)$$

где  $c$  — некоторые числа, среди которых могут быть и одинаковые. Такое разбиение на множители может быть произведено для случая, когда  $\xi$  — линейный оператор, точно так же, как и для обычной алгебраической переменной, поскольку в формуле (18) не содержится величин, коммутирующих с  $\xi$ . Обозначим через  $\chi_r(\xi)$  частное от деления  $\varphi(\xi)$  на  $(\xi - c_r)$ , т. е.

$$\varphi(\xi) = (\xi - c_r) \chi_r(\xi) \quad (r = 1, 2, 3, \dots, n).$$

Тогда для любого кет-вектора  $|P\rangle$  выполняется равенство

$$(\xi - c_r) \chi_r(\xi) |P\rangle = \varphi(\xi) |P\rangle = 0. \quad (19)$$

Далее  $\chi_r(\xi) |P\rangle$  не может быть равно нулю для любого  $|P\rangle$ , ибо в этом случае  $\chi_r(\xi)$  само было бы равно нулю и  $\xi$  удовлетворяло бы уравнению  $(n-1)$ -й степени, что противоречит предположению о том, что (17) есть простейшее уравнение, которому удовлетворяет  $\xi$ . Если выбрать  $|P\rangle$  так, чтобы выражение  $\chi_r(\xi) |P\rangle$  не исчезало, то из уравнения (19) следует, что  $\chi_r(\xi) |P\rangle$  есть собственный кет-вектор оператора  $\xi$ , относящийся к собственному значению  $c_r$ . Это рассуждение годится для любого  $r$  от 1 до  $n$ , и, следовательно, каждое из чисел  $c$  есть собственное значение  $\xi$ . Никакое другое число не может быть собственным значением  $\xi$ . Действительно, если  $\xi'$  есть собственное значение, относящееся к собственному кет-вектору  $|\xi'\rangle$ , т. е.

$$\xi |\xi'\rangle = \xi' |\xi'\rangle,$$

то мы получаем отсюда

$$\varphi(\xi) |\xi'\rangle = \varphi(\xi') |\xi'\rangle,$$

а так как левая часть уравнения равна нулю, то и  $\varphi(\xi') = 0$ .

Чтобы закончить доказательство утверждения ( $\alpha$ ), мы должны убедиться, что все числа  $c$  различны. Допустим, что не все  $c$  различны и что  $c_s$  встречается  $m$  раз, где  $m > 1$ . Тогда  $\varphi(\xi)$  имеет вид

$$\varphi(\xi) \equiv (\xi - c_s)^m \theta(\xi),$$

причем  $\theta(\xi)$  есть целая рациональная функция от  $\xi$ . Далее, из уравнения (17) следует, что уравнение

$$(\xi - c_s)^m \theta(\xi) |A\rangle = 0 \quad (20)$$

справедливо для любого кет-вектора  $|A\rangle$ . Поскольку число  $c_s$  есть собственное значение вещественного оператора  $\xi$ , оно должно быть вещественным, так что  $\xi - c_s$  есть вещественный линейный оператор. Уравнение (20) имеет теперь тот же вид, что и уравнение (8), в котором  $\xi$  заменено на  $\xi - c_s$ , а  $|P\rangle$  на  $\theta(\xi) |A\rangle$ . На основании теоремы, которая была доказана в связи с уравнением (8), мы можем утверждать, что

$$(\xi - c_s) \theta(\xi) |A\rangle = 0.$$

Поскольку кет  $|A\rangle$  произволен, то

$$(\xi - c_s) \theta(\xi) = 0,$$

что противоречит предположению о том, что (17) есть простейшее уравнение, которому удовлетворяет  $\xi$ . Следовательно, все числа  $c$  различны, и утверждение (α) доказано.

Обозначим через  $\chi_r(c_r)$  то число, которое получится, если в алгебраическое выражение  $\chi_r(\xi)$  подставить вместо  $\xi$  число  $c_r$ . Поскольку все  $c$  различны,  $\chi_r(c_r)$  не может быть равно нулю. Рассмотрим далее выражение

$$\sum_r \frac{\chi_r(\xi)}{\chi_r(c_r)} = 1. \quad (21)$$

Если в него подставить  $c_s$  вместо  $\xi$ , то все члены суммы, за исключением члена  $r = s$ , обратятся в нуль. Это следует из того, что множитель  $(\xi - c_s)$  содержится во всех функциях  $\chi_r(\xi)$ , за исключением той, для которой  $r = s$ . Член суммы, для которого  $r = s$ , равен единице, и, следовательно, все выражение (21) обращается в нуль, если вместо  $\xi$  подставить любое из  $n$  чисел  $c_1, c_2, \dots, c_n$ . Поскольку, однако, выражение (21) есть целая рациональная функция от  $\xi$  степени  $n - 1$ , оно должно быть тождественно равно нулю. Если теперь подействовать линейным оператором (21) на произвольный кет  $|P\rangle$  и приравнять результат нулю, мы получим

$$|P\rangle = \sum_r \frac{1}{\chi_r(c_r)} \chi_r(\xi) |P\rangle. \quad (22)$$

Но, согласно уравнению (19), каждый из членов этой суммы является собственным кет-вектором  $\xi$ , если только он не обращается в нуль. Таким образом, уравнение (22) выражает произвольный кет  $|P\rangle$  в виде суммы собственных векторов оператора  $\xi$ , и утверждение (β) доказано.

В качестве простого примера рассмотрим вещественный линейный оператор  $\sigma$ , который удовлетворяет уравнению

$$\sigma^2 = 1. \quad (23)$$

Тогда  $\sigma$  имеет два собственных значения 1 и  $-1$ . Любой вектор  $|P\rangle$  может быть представлен в виде

$$|P\rangle = \frac{1}{2}(1 + \sigma)|P\rangle + \frac{1}{2}(1 - \sigma)|P\rangle.$$

Легко убедиться, что оба члена в правой части этого равенства являются собственными кет-векторами оператора  $\sigma$  (если только они не обращаются в нуль), относящимися соответственно к собственным значениям 1 и  $-1$ .

## § 10. Наблюдаемые

Мы сделали ряд предположений о том, каким образом представляются математически в нашей теории состояния и динамические переменные. Эти предположения сами по себе не являются законами природы, однако они станут законами природы, если мы сделаем некоторые дальнейшие предположения, позволяющие дать физическую интерпретацию теории. Эти дальнейшие предположения должны установить связь между результатами опытов, с одной стороны, и математическим аппаратом, с другой стороны.

Производя опыт, мы измеряем некоторую динамическую переменную. Физически очевидно, что результатом такого опыта всегда будет вещественное число, поэтому следует ожидать, что любая динамическая переменная, которую мы можем измерить, должна быть вещественной динамической переменной. Казалось бы, измерение комплексной динамической переменной можно было бы произвести, измеряя порознь ее вещественную и чисто мнимую части. Однако такое действие включает в себя два измерения или два опыта, проведение которых возможно в классической механике и не всегда возможно в квантовой, поскольку оба опыта могут мешать друг другу. Вообще говоря, нельзя считать,

что два измерения могут быть проведены точно и одновременно, а если же их провести почти сразу одно за другим, то первое обычно приводит к возмущению состояния системы и к неопределенности, которая влияет на второе измерение. Поэтому мы должны считать, что динамические переменные, которые мы можем измерить, вещественны, условие их вещественности в квантовой механике сформулировано в § 8. Однако и не всякая вещественная динамическая переменная может быть измерена. Необходимы еще дальнейшие ограничивающие условия, как мы увидим далее.

Сделаем теперь некоторые предположения, связанные с физическим толкованием теории. *Если динамическая система находится в собственном состоянии вещественной динамической переменной  $\xi$ , которое относится к собственному значению  $\xi'$ , то в результате измерения  $\xi$  мы наверняка получим число  $\xi'$* . Обратно, *если система находится в таком состоянии, что измерение динамической переменной  $\xi$  наверняка дает один определенный результат* (вместо того чтобы давать, в общем случае, тот или иной из всех возможных результатов в соответствии с вероятностными законами), *то система находится в состоянии, которое является собственным состоянием  $\xi$ , а результатом измерения будет то собственное значение переменной  $\xi$ , к которому относится собственное состояние*. Эти предположения разумны, поскольку собственные значения вещественного линейного оператора вещественны.

Отметим некоторые прямые следствия из этого предположения. Если мы имеем два или более собственных состояний динамической переменной  $\xi$ , относящихся к одному собственному значению  $\xi$ , то любое состояние, полученное путем суперпозиции этих состояний, будет также собственным состоянием переменной  $\xi$  и относится к тому же собственному значению  $\xi'$ . Мы можем, следовательно, утверждать, что если имеются два или более состояний, для которых измерение  $\xi$  наверняка приводит к результату  $\xi'$ , то и для состояния, полученного в результате их суперпозиции, результатом измерения  $\xi$  также будет наверняка  $\xi'$ . Это позволяет нам отчасти понять физический смысл суперпозиции состояний. Далее, два собственных состояния  $\xi$ , относящихся к разным собственным значениям, ортогональны. Мы можем утверждать, что два состояния, для которых измерение  $\xi$  дает наверняка два разных результата,

ортогональны. Это позволяет нам отчасти понять физический смысл ортогональных состояний.

Когда мы измеряем вещественную динамическую переменную  $\xi$ , то возмущение, вызванное актом измерения, вызывает скачок в состоянии динамической системы. Если мы производим второе измерение той же самой динамической переменной  $\xi$  непосредственно после первого измерения, то вследствие физической непрерывности результат второго измерения должен быть тот же, что и результат первого \*). Таким образом, после того как произведено первое измерение, в результатах второго нет никакой неопределенности. Поэтому после того, как произведено первое измерение, система находится в собственном состоянии динамической переменной  $\xi$ , а собственное значение, к которому это состояние относится, равно результату первого измерения. Это утверждение остается справедливым и в том случае, если второе измерение фактически не производилось. Таким образом, мы видим, что измерение всегда вызывает скачок системы в собственное состояние той динамической переменной, измерение которой производилось, а собственное значение, к которому относится это собственное состояние, равно результату измерения.

Мы можем утверждать, что в каком бы состоянии ни находилась динамическая система, *результатом измерения вещественной динамической переменной будет одно из собственных значений этой переменной*. Наоборот, *любое собственное значение является возможным результатом измерения динамической переменной для некоторых состояний системы*. В самом деле, мы наверняка получим этот результат, если система находится в собственном состоянии, относящемся к этому собственному значению. Отсюда ясен физический смысл собственных значений. Совокупность собственных значений динамической переменной представляет просто возможные результаты измерений этой динамической переменной, и поэтому задача о вычислении собственных значений является важной задачей.

Сделаем еще одно предположение, связанное с физическим толкованием теории, а именно: *пусть система нахо-*

---

\*) Это рассуждение непоследовательно, так как нельзя ссылаться на физическую непрерывность, если акт измерения вызывает скачок. (Прим. В. А. Фока.)

дится в некотором состоянии и над ней производится измерение некоторой вещественной динамической переменной. Тогда состояния, в которые может перейти система в результате измерения, таковы, что начальное состояние линейно выражается через них. Поскольку все эти состояния, в которые может перейти система, являются собственными состояниями переменной  $\xi$ , исходное состояние должно линейно выражаться через собственные состояния этой переменной. Но исходное состояние может быть любым и, таким образом, любое состояние линейно выражается через собственные состояния  $\xi$ . Если любое состояние может быть линейно выражено через состояния, относящиеся к некоторой системе векторов, то мы, по определению, назовем такую систему *полной*. Тогда наше заключение можно сформулировать в следующем виде: собственные состояния переменной  $\xi$  образуют *полную систему*.

Не всякая вещественная динамическая переменная обладает достаточным количеством собственных состояний, чтобы образовать полную систему. Те переменные, собственные состояния которых не образуют полной системы, не являются величинами, которые могут быть измерены. Таким образом, мы, помимо условия вещественности, получили еще одно условие, которому должна удовлетворять динамическая переменная, для того чтобы ее можно было измерить. Те динамические переменные, собственные состояния которых образуют полную систему, мы будем называть *наблюдаемыми*. Итак, любая величина, которую можно измерить, есть наблюдаемая.

Возникает естественный вопрос: может ли быть измерена любая наблюдаемая? Теоретически на этот вопрос можно ответить — да. Практически может оказаться, что весьма затруднительно построить такой прибор, который мог бы измерять некоторую определенную наблюдаемую. Возможно, что экспериментатор не сможет сказать, как построить такой прибор, однако теоретически всегда можно вообразить, что такое измерение может быть произведено.

Выясним, как выражается математически условие того, что динамическая переменная  $\xi$  является наблюдаемой. Ее собственные значения могут состоять из (конечного или бесконечного) дискретного ряда чисел или же они могут состоять из всех чисел в некотором интервале, например из всех чисел в промежутке от  $a$  до  $b$ . В первом случае любое

состояние будет линейно зависеть от собственных состояний  $\xi$ , если любой вектор состояния может быть представлен в виде суммы собственных векторов  $\xi$ . Во втором случае это требование должно быть несколько изменено, поскольку вместо суммы следует брать интеграл, т. е. в этом случае требуется, чтобы кет  $|P\rangle$  мог быть представлен в виде интеграла от собственных кет-векторов  $\xi$ :

$$|P\rangle = \int |\xi'\rangle d\xi', \quad (24)$$

где  $|\xi'\rangle$  — собственный кет-вектор переменной  $\xi$ , относящийся к собственному значению  $\xi'$ , а областью интегрирования является область собственных значений, соответствующих тем векторам, от которых линейно зависит данный вектор. Не всякий кет, линейно зависящий от собственных кет-векторов переменной  $\xi$ , может быть представлен, согласно формуле (24), в виде интеграла. Это видно из того, что сам собственный кет-вектор, или, в более общем случае, произвольная сумма собственных кет-векторов, не может быть представлена в таком виде. Условие того, что собственные состояния переменной  $\xi$  образуют полную систему, формулируется поэтому так: произвольный кет  $|P\rangle$  можно выразить в виде интеграла и суммы собственных значений переменной  $\xi$ , т. е.

$$|P\rangle = \int |\xi'c\rangle d\xi' + \sum_r |\xi'd\rangle, \quad (25)$$

где все кет-векторы  $|\xi'c\rangle$  и  $|\xi'd\rangle$  являются собственными векторами переменной  $\xi$ , а значки  $c$  (continuous — непрерывный) и  $d$  (discrete — дискретный) введены для того, чтобы различать эти векторы в случае, когда  $\xi'$  и  $\xi''$  равны; интеграл берется по всей области изменения собственных значений, а сумма — лишь по некоторым отдельным собственным значениям. Таким образом, в случае, когда собственными значениями переменной  $\xi$  являются все числа в некотором интервале, то переменная  $\xi$  является наблюдаемой при выполнении условия (25).

Встречается иногда и более общий случай, когда множество собственных значений представляет собой некоторый интервал, и, кроме того, дискретный ряд чисел, лежащих вне этого интервала. Условие того, чтобы динамическая переменная  $\xi$  была наблюдаемой, остается в этом случае прежним: необходимо, чтобы произвольный кет можно



было выразить в виде правой части формулы (25), причем под суммой по  $r$  в этом случае понимается суммирование как по дискретному ряду собственных значений, лежащему вне сплошного спектра, так и по дискретным собственным значениям переменной  $\xi$ , лежащим внутри сплошного спектра.

Математически часто бывает трудно установить, удовлетворяет ли динамическая переменная этим условиям, т. е. является ли она наблюдаемой, поскольку задача определения собственных значений и собственных векторов, вообще говоря, весьма трудна. Однако в ряде случаев мы можем и на основании экспериментальных фактов утверждать с достаточным основанием, что динамическая переменная может быть измерена; тогда мы можем считать, что она является наблюдаемой, несмотря на отсутствие математического доказательства. Мы будем часто поступать таким образом в процессе построения теории, например, мы будем считать, что энергия любой динамической системы всегда является наблюдаемой, хотя, за исключением простейших случаев, доказательство этого утверждения невозможно провести средствами современного математического анализа.

В частном случае, когда динамическая переменная — число, любое состояние является собственным состоянием и динамическая переменная, очевидно, является наблюдаемой. Любое измерение этого числа всегда дает один и тот же результат, так что это число будет физической константой, подобной заряду электрона. Физическая константа в квантовой механике может, таким образом, рассматриваться либо как наблюдаемая с единственным собственным значением, либо как обычное число, появляющееся в уравнениях. Обе точки зрения эквивалентны.

Если вещественная динамическая переменная удовлетворяет алгебраическому уравнению, то из утверждения (β) предыдущего параграфа следует, что динамическая переменная является наблюдаемой. Такая наблюдаемая имеет конечное число собственных значений. Наоборот, любая наблюдаемая с конечным числом собственных значений удовлетворяет алгебраическому уравнению. Действительно, пусть  $\xi'$ ,  $\xi''$ , ...,  $\xi^n$  — собственные значения наблюдаемой  $\xi$ , тогда уравнение

$$(\xi - \xi')(\xi - \xi'') \dots (\xi - \xi^n) | P \rangle = 0$$

справедливо для любого собственного кет-вектора переменной  $\xi$ , а следовательно, оно справедливо и для любого  $|P\rangle$ , поскольку переменная  $\xi$  является наблюдаемой и любой кет-вектор состояния может быть представлен в виде суммы собственных кет-векторов. Следовательно,

$$(\xi - \xi')(\xi - \xi'') \dots (\xi - \xi^n) = 0. \quad (26)$$

В качестве примера рассмотрим линейный оператор  $|A\rangle\langle A|$ , где  $|A\rangle$  — нормированный кет. Этот линейный оператор веществен согласно формуле (7), а его квадрат равен

$$||A\rangle\langle A|\|^2 = |A\rangle\langle A|A\rangle\langle A| = |A\rangle\langle A|, \quad (27)$$

поскольку  $\langle A|A\rangle = 1$ . Таким образом, квадрат этого оператора равен ему самому. Следовательно, оператор удовлетворяет алгебраическому уравнению и является наблюдаемой. Его собственными значениями будут 1 и 0, причем собственный кет-вектор  $|A\rangle$  соответствует собственному значению 1, а любой кет, ортогональный к  $|A\rangle$ , соответствует собственному значению 0. Измерение этой наблюдаемой наверняка дает результат 1, если динамическая система находится в состоянии, соответствующем вектору  $|A\rangle$ , и результат 0, если система находится в ортогональном состоянии, так что эту наблюдаемую можно рассматривать как величину, которая определяет, находится ли система в состоянии  $|A\rangle$  или нет.

Прежде чем окончить этот параграф, рассмотрим условия того, что интеграл, подобный интегралу в формуле (24), имеет смысл. Пусть  $|X\rangle$  и  $|Y\rangle$  — два кет-вектора, которые могут быть выражены в виде интегралов от собственных кет-векторов переменной  $\xi$ ,

$$|X\rangle = \int |\xi'x\rangle d\xi', \quad |Y\rangle = \int |\xi''y\rangle d\xi'',$$

где  $x$  и  $y$  — значки, позволяющие различать оба подынтегральных выражения. Тогда, взяв уравнение, сопряженное первому, и умножая его на второе, получаем

$$\langle X|Y\rangle = \int \int \langle \xi'x|\xi''y\rangle d\xi' d\xi''. \quad (28)$$

Рассмотрим теперь интеграл

$$\int \langle \xi'x|\xi''y\rangle d\xi''. \quad (29)$$

Согласно теореме ортогональности подынтегральное выражение в нем должно исчезать во всей области интегрирования, за исключением одной точки  $\xi'' = \xi'$ . Если подынтегральное выражение в этой точке конечно, то интеграл (29) исчезает, и если это справедливо для всех  $\xi'$ , то из формулы (28) мы получаем, что исчезает также  $\langle X | Y \rangle$ . Но поскольку, вообще говоря,  $\langle X | Y \rangle$  не равно нулю, постольку  $\langle \xi'x | \xi'y \rangle$  должно быть бесконечно велико, так чтобы интеграл (29) не исчезал и был конечным. В § 15 обсуждается, каким образом должно стремиться к бесконечности это выражение, для того чтобы указанные требования были выполнены.

До сих пор во всех наших рассуждениях подразумевалось, что наши бра-векторы и кет-векторы имеют конечную длину и их скалярное произведение конечно. Мы видим теперь, что необходимо ослабить это условие, когда мы имеем дело с наблюдаемой, собственные значения которой заполняют некоторый интервал. Если этого не сделать, то нельзя будет рассматривать случай, когда собственные значения заполняют область (сплошной спектр собственных значений), и наша теория будет недостаточной для рассмотрения большинства практических задач.

Полагая выше  $|Y\rangle = |X\rangle$ , мы получаем, что, вообще говоря,  $\langle \xi'x | \xi'x \rangle$  бесконечно велико. Мы примем, что если  $|\xi'x\rangle \neq 0$ , то

$$\int \langle \xi'x | \xi''x \rangle d\xi'' > 0. \quad (30)$$

Эта аксиома для векторов бесконечной длины аналогична условию (8) в § 6.

Пространство бра-векторов и кет-векторов, имеющих конечную длину и конечное скалярное произведение, называется математиками пространством Гильберта. Бра-векторы и кет-векторы, которые мы теперь используем, образуют пространство более общее, чем пространство Гильберта.

Далее, мы можем убедиться в том, что разложение кет-вектора  $|P\rangle$ , согласно формуле (25), является единственным, если только в сумме нет двух или большего числа членов, относящихся к одному и тому же собственному значению. Чтобы доказать это, допустим, что возможны два различных разложения для  $|P\rangle$ . Тогда, вычитая одно из

другого, получаем уравнение вида

$$0 = \int |\xi'a\rangle d\xi' + \sum_s |\xi's\rangle, \quad (31)$$

где  $a$  и  $b$  — новые значки, характеризующие собственные векторы, а сумма по  $s$  включает в себя все члены, оставшиеся после вычитания одной суммы из другой. Если в сумме по  $s$  имеется член, соответствующий собственному значению  $\xi'$ , лежащему вне сплошного интервала, то, умножая (31) слева на  $\langle \xi'b |$  и используя теорему ортогональности, получаем

$$0 = \langle \xi'b | \xi'b \rangle,$$

что противоречит условию (8) § 6. Далее, если подынтегральное выражение не исчезает для некоторого собственного значения  $\xi''$ , не равного значениям  $\xi^s$ , имеющимся в сумме, то, умножая (31) слева на  $\langle \xi''a |$  и используя теорему ортогональности, получаем

$$0 = \int \langle \xi''a | \xi'a \rangle d\xi',$$

что противоречит условию (30). Наконец, если в выражении (31) имеется член в сумме, соответствующий собственному значению  $\xi'$ , лежащему внутри интервала, то, умножая (31) слева на  $\langle \xi'b |$  и на  $\langle \xi'a |$ , получаем

$$0 = \int \langle \xi'b | \xi'a \rangle d\xi' + \langle \xi'b | \xi'b \rangle, \quad (32)$$

$$0 = \int \langle \xi'a | \xi'a \rangle d\xi' + \langle \xi'a | \xi'b \rangle. \quad (33)$$

Интеграл в выражении (33) конечен, а следовательно, конечны также произведения  $\langle \xi'a | \xi'b \rangle$  и  $\langle \xi'b | \xi'a \rangle$ . Отсюда следует, что интеграл в выражении (32) равен нулю, т. е. равно нулю произведение  $\langle \xi'b | \xi'b \rangle$ , и мы снова приходим к противоречию. Таким образом, все члены в выражении (31) должны быть равны нулю и разложение кет-вектора  $|P\rangle$  в форме (25) является единственным.

## § 11. Функции наблюдаемых

Пусть  $\xi$  — некоторая наблюдаемая. Мы можем умножить ее на вещественное число  $k$  и получить новую наблюдаемую  $k\xi$ . Если система находится в таком состоянии, что измерение переменной  $\xi$  наверняка дает результат  $\xi'$ , то

измерение переменной  $k\xi$  должно обязательно дать результат  $k\xi'$ . Это условие должно выполняться для того, чтобы теория была самосогласованной. Легко убедиться, что оно действительно выполняется. Кет, соответствующий тому состоянию, для которого измерение  $\xi$  наверняка приводит к результату  $\xi'$ , есть собственный кет-вектор наблюдаемой  $\xi$ , т. е. кет-вектор  $|\xi'\rangle$ , удовлетворяющий уравнению

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle.$$

Из этого уравнения следует

$$k\xi|\xi'\rangle = k\xi'|\xi'\rangle,$$

откуда видно, что  $|\xi'\rangle$  является также собственным кет-вектором наблюдаемой  $k\xi$  с собственным значением  $k\xi'$ , и, следовательно, измерение  $k\xi$  наверняка даст результат  $k\xi'$ .

В более общем случае мы можем взять вещественную функцию  $f(\xi)$  от  $\xi$  и рассматривать ее как новую наблюдаемую, которая будет измерена автоматически, как только измерена  $\xi$ , так как экспериментальное определение величины  $\xi$  дает нам также и значение  $f(\xi)$ . Не обязательно считать  $f(\xi)$  вещественной функцией; если  $f(\xi)$  комплексна, то ее вещественная и мнимая части будут являться двумя наблюдаемыми, которые измеряются автоматически, как только измерена  $\xi$ . Если система находится в таком состоянии, что измерение  $\xi$  наверняка дает результат  $\xi'$ , то измерение вещественной и чисто мнимой частей  $f(\xi)$  должно наверняка дать в качестве результатов вещественную и мнимую части от  $f(\xi')$ . Выполнение этого условия необходимо для того, чтобы теория была непротиворечива. В том случае, когда  $f(\xi)$  можно представить в виде степенного ряда

$$f(\xi) = c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + c_3\xi^3 + \dots,$$

в котором коэффициенты  $c$  — числа, выполнение этого условия может быть снова проверено с помощью элементарной алгебры. В случае более общих функций  $f$  проверка условия может оказаться невозможной. Тогда само условие может быть использовано для определения переменной  $f(\xi)$ , поскольку она еще не была определена математически. Таким путем мы можем получить более общее определение функции от наблюдаемой, чем то, которое получается с помощью степенного ряда.

Определим в общем случае  $f(\xi)$  как такой линейный оператор, который удовлетворяет уравнению

$$f(\xi)|\xi'\rangle = f(\xi')|\xi\rangle \quad (34)$$

для любого собственного кет-вектора  $|\xi'\rangle$  переменной  $\xi$ , причем каждому собственному значению  $\xi'$  сопоставляется некоторое число  $f(\xi')$ . Легко убедиться, что это определение самосогласовано также и по отношению к линейно независимым собственным кет-векторам  $|\xi'\rangle$ . Если мы имеем собственный кет-вектор  $|\xi'A\rangle$ , линейно зависящий от других собственных кет-векторов переменной  $\xi$ , то эти другие собственные кет-векторы все должны относиться к тому же самому собственному значению  $\xi'$ , в противном случае должно было бы выполняться уравнение типа (31), что, как мы видели, невозможно. Возьмем уравнение, которое выражает  $|\xi'A\rangle$  линейно через другие собственные кет-векторы переменной  $\xi$ , и подействуем на обе части этого уравнения слева оператором  $f(\xi)$ . При этом мы просто умножим каждый член уравнения на число  $f(\xi')$ , так что оно, очевидно, будет по-прежнему удовлетворяться. Далее, уравнения (34) достаточно для того, чтобы определить оператор  $f(\xi)$  полностью. Действительно, для того чтобы получить результат действия  $f(\xi)$  на любой кет  $|P\rangle$ , нам достаточно разложить  $|P\rangle$  согласно формуле (25), а затем положить

$$f(\xi)|P\rangle = \int f(\xi')|\xi'c\rangle d\xi' + \sum_r f(\xi_r)|\xi_rd\rangle. \quad (35)$$

Сопряженный оператор  $\bar{f}(\xi)$  определяется уравнением, сопряженным уравнению (31), т. е.

$$\langle\xi'|\bar{f}(\xi) = \bar{f}(\xi')\langle\xi'|,$$

которое должно выполняться для любого собственного бра-вектора, причем  $\bar{f}(\xi')$  — функция, комплексно-сопряженная функции  $f(\xi')$ . Заменим в этом уравнении  $\xi'$  на  $\xi''$  и умножим его справа на произвольный кет  $|P\rangle$ . Тогда, используя разложение (25) для  $|P\rangle$ , получаем

$$\begin{aligned} \langle\xi''|\bar{f}(\xi)|P\rangle &= \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|P\rangle = \\ &= \int \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi'c\rangle d\xi' + \sum_r \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi_rd\rangle = \\ &= \int \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi'c\rangle d\xi' + \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi''d\rangle. \end{aligned} \quad (36)$$

При этом использована теорема ортогональности и подразумевается, что  $\langle \xi'' | \xi'' d \rangle$  равно нулю, если  $\xi''$  не совпадает ни с одним из собственных значений, встречающихся в сумме. Далее, подставляя вместо  $f(\xi')$  комплексно-сопряженную функцию  $\bar{f}(\xi')$  в уравнении (35) и умножая его слева на  $\langle \xi'' |$ , получаем

$$\langle \xi'' | \bar{f}(\xi) | P \rangle = \int \bar{f}(\xi') \langle \xi'' | \xi' c \rangle d\xi' + \bar{f}(\xi'') \langle \xi'' | \xi'' d \rangle.$$

Правые части этого уравнения и уравнения (36) совпадают, поскольку подынтегральное выражение равно нулю при  $\xi' \neq \xi''$ , и, следовательно,

$$\langle \xi'' | \bar{f}(\xi) | P \rangle = \langle \xi'' | \bar{f}(\xi) | P \rangle.$$

Это уравнение справедливо для любого собственного бра-вектора  $\langle \xi'' |$  и для любого кет-вектора  $|P\rangle$ , и, следовательно,

$$\bar{f}(\xi) = \bar{f}(\xi). \quad (37)$$

Таким образом, оператор, сопряженный линейному оператору  $f(\xi)$ , есть комплексно-сопряженная функция  $\bar{f}$  от оператора  $\xi$ .

Отсюда, в частности, следует, что если  $f(\xi')$  — вещественная функция от  $\xi'$ , то  $f(\xi)$  — вещественный линейный оператор;  $f(\xi)$  является, кроме того, и наблюдаемой, так как каждое собственное состояние  $\xi$  является и собственным состоянием  $f(\xi)$ , а система этих собственных состояний является полной.

Используя сделанное выше определение, мы можем придать смысл любой функции  $f$  от наблюдаемой, предполагая лишь, что область, в которой определена функция вещественной переменной  $f(x)$ , включает в себя все собственные значения наблюдаемой. Если область существования содержит, помимо собственных значений, еще и другие точки, то значения  $f(x)$  в этих точках никак не повлияют на функцию от наблюдаемой. Функция не обязательно должна быть аналитической или непрерывной. Собственными значениями функции от наблюдаемой будут функции от собственных значений самой наблюдаемой.

Важно отметить, что определить функцию от наблюдаемой возможно лишь в том случае, если для каждого значения  $x$ , равного собственному значению наблюдаемой,

существует лишь единственное значение  $f(x)$ . Таким образом, функция  $f(x)$  должна быть однозначной \*). Это утверждение можно проиллюстрировать, рассматривая следующий вопрос: если мы имеем наблюдаемую  $f(A)$ , которая является вещественной функцией от наблюдаемой  $A$ , то является ли в свою очередь  $A$  функцией от наблюдаемой  $f(A)$ ? Ответ на этот вопрос будет положителен, если различным собственным значениям  $A'$  наблюдаемой  $A$  всегда соответствуют различные значения  $f(A')$ . Если же существуют два различных собственных значения  $A'$  и  $A''$  наблюдаемой  $A$  такие, что  $f(A') = f(A'')$ , то собственному значению  $f(A')$  наблюдаемой  $f(A)$  не будет соответствовать единственное собственное значение наблюдаемой  $A$ , и, следовательно, наблюдаемая  $A$  не будет являться функцией от наблюдаемой  $f(A)$ .

Используя определение, легко установить математически, что сумма или произведение двух функций от наблюдаемой также будет функцией этой наблюдаемой и что функция от функции наблюдаемой также будет функцией той же наблюдаемой. Также легко убедиться, что вся теория функций наблюдаемой симметрична по отношению к бра-векторам и кет-векторам, и что мы могли бы с таким же успехом исходить из уравнения

$$\langle \xi' | f(\xi) = f(\xi') \langle \xi' | \quad (38)$$

вместо уравнения (34).

Закончим этот параграф разбором двух примеров, которые имеют большое практическое значение, а именно, рассмотрим обратную величину и квадратный корень. Обратная величина от наблюдаемой существует, если наблюдаемая не имеет собственного значения нуль. Пусть наблюдаемая  $\alpha$  не имеет собственного значения нуль; тогда обратная величина, которую мы обозначим  $\alpha^{-1}$  или  $1/\alpha$  будет удовлетворять уравнению

$$\alpha^{-1} | \alpha' \rangle = \alpha'^{-1} | \alpha' \rangle, \quad (39)$$

где  $| \alpha' \rangle$  — собственный кет-вектор наблюдаемой  $\alpha$ , относящийся к собственному значению  $\alpha'$ . Отсюда следует

$$\alpha \alpha^{-1} | \alpha' \rangle = \alpha \alpha'^{-1} | \alpha' \rangle = | \alpha' \rangle.$$

---

\*) В той области, в которой расположены собственные значения наблюдаемой. (Прим. В. А. Фока).



Поскольку это равенство справедливо для любого собственного кет-вектора  $|\alpha'\rangle$ , мы получаем

$$\alpha\alpha^{-1} = 1. \quad (40)$$

Аналогично

$$\alpha^{-1}\alpha = 1. \quad (41)$$

Каждого из этих уравнений достаточно для того, чтобы полностью определить наблюдаемую  $\alpha^{-1}$ , если только наблюдаемая  $\alpha$  не имеет собственного значения нуль. Докажем это, например, для уравнения (40). Пусть  $x$  — линейный оператор, удовлетворяющий уравнению

$$\alpha x = 1.$$

Умножим это уравнение слева на оператор  $\alpha^{-1}$ , который определен уравнением (39). Получаем

$$\alpha^{-1}\alpha x = \alpha^{-1}$$

и отсюда, используя (41), имеем

$$x = \alpha^{-1}.$$

Уравнения (40) и (41) можно использовать для определения оператора, обратного (если только он существует) общему линейному оператору  $\alpha$ , который может быть даже и не вещественным. В последнем случае одного из этих уравнений может оказаться недостаточно. Если обратные операторы имеются у каждого из двух линейных операторов  $\alpha$  и  $\beta$ , то их произведение также имеет обратный оператор, который равен

$$(\alpha\beta)^{-1} = \beta^{-1}\alpha^{-1} \quad (42)$$

и может быть получен, если обратить каждый из сомножителей и взять их в обратной последовательности. Справедливость формулы (42) видна из того, что ее правая часть дает единицу при умножении на  $\alpha\beta$  как справа, так и слева. Этот закон для обращения произведения можно немедленно обобщить на случай большего числа сомножителей, т. е. можно написать

$$(\alpha\beta\gamma \dots)^{-1} = \dots \gamma^{-1}\beta^{-1}\alpha^{-1}.$$

Квадратный корень от наблюдаемой  $\alpha$  всегда существует, а если  $\alpha$  не имеет отрицательных собственных значений, то

он веществен. Мы обозначим его  $\sqrt{\alpha}$  или  $\alpha^{1/2}$ . Он удовлетворяет уравнению

$$\sqrt{\alpha}|\alpha'\rangle = \pm \sqrt{\alpha'}|\alpha'\rangle, \quad (43)$$

где  $|\alpha'\rangle$  — собственный кет-вектор переменной  $\alpha$  с собственным значением  $\alpha'$ . Отсюда имеем

$$\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha'}|\alpha'\rangle = \sqrt{\alpha'}\sqrt{\alpha'}|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle = \alpha|\alpha'\rangle,$$

и поскольку это равенство справедливо для любого собственного кет-вектора  $|\alpha'\rangle$ , должно выполняться равенство

$$\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha} = \alpha. \quad (44)$$

Вследствие того, что знак в формуле (43) произволен, существует много квадратных корней. Для того чтобы выбрать один из них, мы должны определить знак в уравнении (43) для каждого собственного значения. Этот знак может меняться нерегулярно от одного собственного значения к другому, при этом уравнение (43) будет всегда определять некоторый линейный оператор  $\sqrt{\alpha}$ , удовлетворяющий уравнению (44) и являющийся квадратным корнем из  $\alpha$ . Если одно собственное значение соответствует нескольким собственным кет-векторам, то мы, в соответствии с нашим определением функции, должны иметь в уравнении (43) одинаковый знак для всех этих собственных кет-векторов. Однако если мы возьмем разные знаки, то уравнение (44) будет по-прежнему выполняться и поэтому уравнение (44) само по себе не определяет  $\sqrt{\alpha}$ , за исключением особого случая, когда каждому собственному значению соответствует лишь один независимый собственный кет-вектор.

Число различных квадратных корней от наблюдаемой равно  $2^n$ , где  $n$  есть полное число не равных нулю собственных значений. Практически эта функция используется лишь для наблюдаемых, не имеющих отрицательных собственных значений, причем обычно используется тот квадратный корень, для которого в формуле (43) всегда стоит знак плюс. Этот частный вид квадратного корня называется *положительным квадратным корнем*.

## § 12. Общее физическое толкование

Те предположения, которые мы сделали в начале § 10 для того, чтобы получить физическое толкование математической теории, носили довольно частный характер, так как их можно было использовать только по отношению к собственным состояниям. Необходимы более общие предположения, которые позволили бы нам извлечь физические сведения из математической схемы и в том случае, когда мы не имеем дела с собственными состояниями.

В классической механике наблюдаемая всегда, как мы говорим, «имеет определенное значение» для любого заданного состояния системы. Что соответствует этому в квантовой механике? Если взять наблюдаемую  $\xi$  и какие-либо два состояния  $x$  и  $y$  с соответствующими векторами  $|x\rangle$  и  $|y\rangle$ , то можно составить число  $\langle x | \xi | y \rangle$ . Это число по трем причинам мало похоже на ту величину, которую наблюдаемая может «иметь» согласно классической теории: 1) оно относится к *двум* состояниям системы, в то время как классическое значение относится к *одному* состоянию; 2) оно не является, вообще говоря, вещественным числом; 3) оно не определяется однозначно заданием наблюдаемой и обоих состояний, так как векторы  $|x\rangle$  и  $|y\rangle$  содержат произвольные численные множители. Даже если мы будем считать  $|x\rangle$  и  $|y\rangle$  нормированными, то и тогда в выражении  $\langle x | \xi | y \rangle$  останется неопределенным множитель, равный по модулю единице. Однако все эти три аргумента теряют силу, если положить оба состояния одинаковыми и считать, что  $|y\rangle$  есть кет-вектор сопряженный бра-вектору  $\langle x|$ . Число, которое мы тогда получим, а именно  $\langle x | \xi | x \rangle$ , является всегда вещественным, оно однозначно определено, если кет  $|x\rangle$  нормирован, так как, если мы умножим  $|x\rangle$  на численный множитель  $e^{ic}$ , где  $c$  — некоторое вещественное число, то мы должны умножить  $\langle x|$  на  $e^{-ic}$ , и число  $\langle x | \xi | x \rangle$  не изменится.

На основании этого можно было бы выдвинуть гипотезу о том, что наблюдаемая  $\xi$  «имеет значение»  $\langle x | \xi | x \rangle$  для состояния  $x$ , аналогично тому, как это имеет место в классическом случае. Однако эта гипотеза неудовлетворительна по следующей причине. Рассмотрим вторую наблюдаемую  $\eta$ , которая будет иметь, согласно сделанной гипотезе, значение  $\langle x | \eta | x \rangle$  для того же состояния. Мы должны тогда,

согласно классической аналогии, ожидать, что сумма двух наблюдаемых будет иметь в этом состоянии значение, равное сумме значений каждой из наблюдаемых в отдельности, а произведение двух наблюдаемых будет иметь значение, равное произведению значений каждой из наблюдаемых. В самом деле, согласно нашей гипотезе для суммы двух наблюдаемых получается значение  $\langle x | \xi + \eta | x \rangle$ , которое действительно равно сумме  $\langle x | \xi | x \rangle$  и  $\langle x | \eta | x \rangle$ , но для произведения получается  $\langle x | \xi \eta | x \rangle$  или же  $\langle x | \eta \xi | x \rangle$  — величины, которые не имеют простой связи с величинами  $\langle x | \xi | x \rangle$  и  $\langle x | \eta | x \rangle$ .

Однако, поскольку дело обстоит плохо только в отношении произведения, но не в отношении суммы, имеет смысл считать  $\langle x | \xi | x \rangle$  *средним* значением переменной  $\xi$  в состоянии  $x$ . Это можно сделать потому, что среднее от суммы двух величин должно быть равно сумме их средних значений, но среднее значение произведения не обязательно должно быть равно произведению средних значений. Поэтому мы сделаем основное предположение, что *если производить большое число раз измерение переменной  $\xi$  над системой, находящейся в состоянии, которому соответствует кет  $|x\rangle$ , то среднее от всех полученных результатов будет равно  $\langle x | \xi | x \rangle$ , причем предполагается, что кет  $|x\rangle$  нормирован*. Кет  $|x\rangle$  может быть и не нормирован; это с необходимостью имеет место, если состояние  $x$  есть собственное состояние некоторой наблюдаемой с собственным значением, относящимся к сплошному спектру. В этом случае следует предположить, что средний результат измерения  $\xi$  пропорционален  $\langle x | \xi | x \rangle$ . Это основное предположение дает нам основу для общего физического толкования теории.

Утверждение, что наблюдаемая «имеет определенное значение» для определенного состояния, допустимо в квантовой механике только в частном случае, когда измерение наблюдаемой наверняка приводит к определенному значению, т. е. когда состояние является собственным состоянием этой наблюдаемой. Придавая такой ограниченный смысл этому утверждению, нетрудно показать с помощью алгебры, что если в данном состоянии две наблюдаемые имеют определенное значение, то в этом же состоянии сумма двух наблюдаемых имеет значение, равное сумме значений каждой наблюдаемой в отдельности (если только сумма на-

блюдаемых сама является наблюдаемой \*)), а произведение двух наблюдаемых будет иметь значение, равное произведению значений каждой из наблюдаемых в отдельности (если только произведение наблюдаемых само является наблюдаемой \*\*)).

В общем случае мы не можем говорить, что наблюдаемая имеет определенное значение в данном состоянии, но мы можем говорить, что она имеет определенное среднее значение в данном состоянии. Мы можем пойти далее и говорить о вероятности того, что наблюдаемая имеет некоторое значение, понимая под этим вероятность того, что это значение будет получено, если произвести измерение. Значение для этой вероятности может быть получено из основного предположения следующим путем.

Пусть имеется наблюдаемая  $\xi$ , и пусть состоянию соответствует нормированный вектор  $|x\rangle$ . Тогда из основного предположения следует не только то, что среднее значение  $\xi$  равно  $\langle x | \xi | x \rangle$ , но также и то, что среднее значение любой функции  $f(\xi)$  переменной  $\xi$  также равно  $\langle x | f(\xi) | x \rangle$ . Пусть функция  $f(\xi)$  равна единице при  $\xi = a$ , где  $a$  — некоторое вещественное число, и равна нулю при всех других значениях  $\xi$ . Такая функция имеет смысл согласно нашей общей теории функций от наблюдаемых, и ее можно обозначить  $\delta_{\xi a}$  в соответствии с тем общим смыслом, который придается символу  $\delta$  с двумя значками (см. уравнение (17) § 16). Среднее значение этой функции от  $\xi$  равно как раз вероятности  $P_a$  того, что переменная  $\xi$  имеет значение  $a$ . Таким образом,

$$P_a = \langle x | \delta_{\xi a} | x \rangle. \quad (45)$$

Если  $a$  не является собственным значением  $\xi$ , то  $\delta_{\xi a}$ , действуя на любой собственный вектор наблюдаемой  $\xi$ , дает нуль, следовательно,  $\delta_{\xi a} = 0$  и  $P_a = 0$ . Это согласуется с выводом в § 10, что любой результат измерения наблюдаемой должен быть равен одному из ее собственных значений. Если возможные результаты измерений наблюдаемой об-

---

\*) Это не очевидно, так как собственные состояния суммы могут не обладать свойством полноты. В этом случае сумма, рассматриваемая как отдельная величина, может не быть наблюдаемой.

\*\*) Здесь может не выполняться условие вещественности, а также и условие полноты системы собственных состояний,

разуют непрерывную последовательность, то для большинства физических задач вероятность того, что  $\xi$  имеет строго определенное значение, равна нулю. В этом случае величиной, которая существенна с физической точки зрения, будет вероятность того, что  $\xi$  имеет значение в промежутке между  $a$  и  $a + da$ . Эта вероятность, которую мы обозначим  $P(a) da$ , равна среднему значению такой функции от  $\xi$ , которая равна единице, если  $\xi$  лежит в промежутке между  $a$  и  $a + da$ , и равна нулю вне этого промежутка. Такая функция от  $\xi$  имеет смысл согласно нашей общей теории функций от наблюдаемой. Обозначая эту функцию  $\chi(\xi)$ , имеем

$$P(a) da = \langle x | \chi(\xi) | x \rangle. \quad (46)$$

Если промежуток от  $a$  до  $a + da$  не содержит собственных значений  $\xi$ , то, как это было показано выше,  $\chi(\xi) = 0$  и  $P(a) = 0$ . Если вектор  $|x\rangle$  не нормирован, то правые части формул (45) и (46) будут соответственно пропорциональны вероятности того, что  $\xi$  имеет значение  $a$  и вероятности того, что  $\xi$  имеет значение, лежащее в промежутке от  $a$  до  $a + da$ .

Принятое в § 10 предположение о том, что измерение  $\xi$  наверняка дает результат  $\xi'$ , если система находится в собственном состоянии наблюдаемой  $\xi$  с собственным значением  $\xi'$ , согласуется с нашим основным предположением о физическом толковании и может быть выведено из него. Из основного предположения непосредственно следует, что если  $|\xi'\rangle$  есть собственный кет-вектор наблюдаемой  $\xi$  с собственным значением  $\xi'$ , то в случае дискретных собственных значений

$$\delta_{\xi a} |\xi'\rangle = 0, \quad \text{если } a \neq \xi',$$

и в случае сплошного спектра собственных значений  $\xi$   $\chi(\xi) |\xi'\rangle = 0$ , если  $\xi'$  лежит вне промежутка от  $a$  до  $a + da$ . В любом случае, если состояние характеризуется вектором  $|\xi'\rangle$ , то вероятность того, что  $\xi$  имеет значение, не равное  $\xi'$ , равна нулю.

Собственное состояние наблюдаемой  $\xi$  в собственным значением  $\xi'$ , лежащим в сплошном спектре, практически не может быть строго осуществлено, так как потребовалась бы бесконечно большая точность, чтобы получить  $\xi$  строго равным  $\xi'$ . Самое большее, чего можно добиться практически, —

чтобы  $\xi$  находилось в узком промежутке около значения  $\xi'$ . Система будет тогда находиться в состоянии, приближающемся к собственному состоянию переменной  $\xi$ . Таким образом, собственное состояние, относящееся к собственному значению в сплошном спектре, является математической идеализацией того, что может быть достигнуто практически. Тем не менее эти собственные состояния играют весьма большую роль в теории и без них трудно обойтись. В науке есть много примеров таких теоретических построений, которые являются предельными случаями того, что мы встречаем на практике, и которые полезны для точной формулировки законов природы, хотя экспериментально они не могут быть осуществлены; в данном случае мы имеем пример такого рода. Возможно, что бесконечная длина собственных векторов, соответствующих этим собственным состояниям, связана с их неосуществимостью, и что всем осуществимым состояниям соответствуют такие векторы, которые могут быть нормированы и образуют гильбертово пространство.

### § 13. Коммутативность и совместность

Состояние системы может быть одновременно собственным состоянием двух наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$ . Если состояние характеризуется кет-вектором  $|A\rangle$ , то мы получим тогда уравнения

$$\begin{aligned}\xi|A\rangle &= \xi'|A\rangle, \\ \eta|A\rangle &= \eta'|A\rangle,\end{aligned}$$

где  $\xi'$  и  $\eta'$  — соответственно собственные значения  $\xi$  и  $\eta$ . Тогда мы получаем последовательно

$$\xi\eta|A\rangle = \xi\eta'|A\rangle = \xi'\eta'|A\rangle = \xi'\eta|A\rangle = \eta\xi'|A\rangle = \eta\xi|A\rangle,$$

или

$$(\xi\eta - \eta\xi)|A\rangle = 0.$$

Это наводит на мысль, что наиболее благоприятным для существования общего собственного значения будет тот случай, когда  $\xi\eta - \eta\xi = 0$ , т. е. когда обе наблюдаемые коммутируют. Если же они не коммутируют, то общее собственное состояние, хотя и не невозможно, но оно является скорее исключением, чем правилом. С другой

стороны, если наблюдаемые коммутируют, то имеется столько общих собственных состояний, что они образуют полную систему. Докажем это утверждение.

Пусть  $\xi$  и  $\eta$  — две коммутирующие наблюдаемые. Рассмотрим собственный кет-вектор  $|\eta'\rangle$  наблюдаемой  $\eta$  с собственным значением  $\eta'$  и разложим его по собственным кет-векторам наблюдаемой  $\xi$  согласно формуле (25). Тогда

$$|\eta'\rangle = \int |\xi' \eta' c\rangle d\xi' + \sum_r |\xi' r' d\rangle. \quad (47)$$

Собственные кет-векторы наблюдаемой  $\xi$  в правой части равенства снабжены дополнительным значком  $\eta'$  для того, чтобы подчеркнуть, что они получены не при разложении произвольного кет-вектора, как, скажем, в формуле (25), а при разложении конкретного кет-вектора  $|\eta'\rangle$ . Мы можем теперь показать, что каждый из этих собственных кет-векторов наблюдаемой  $\xi$  является также собственным кет-вектором наблюдаемой  $\eta$  с собственным значением  $\eta'$ . Имеем

$$0 = (\eta - \eta') |\eta'\rangle = \int (\eta - \eta') |\xi' \eta' c\rangle d\xi' + \sum_r (\eta - \eta') |\xi' r' d\rangle. \quad (48)$$

Далее кет  $(\eta - \eta') |\xi' r' d\rangle$  удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \xi (\eta - \eta') |\xi' r' d\rangle &= (\eta - \eta') \xi |\xi' r' d\rangle = \\ &= (\eta - \eta') \xi' |\xi' r' d\rangle = \xi' (\eta - \eta') |\xi' r' d\rangle, \end{aligned}$$

откуда видно, что этот вектор является собственным кет-вектором наблюдаемой  $\xi$  с собственным значением  $\xi'$ ; аналогично вектор  $(\eta - \eta') |\xi' \eta' c\rangle$  является собственным кет-вектором  $\xi$  с собственным значением  $\xi'$ . Таким образом, правая часть уравнения (48) представляет собой суперпозицию (сумма плюс интеграл) собственных кет-векторов наблюдаемой  $\xi$ , причем эта суперпозиция равна нулю, что, как было доказано для уравнения (31), невозможно, если только подынтегральное выражение и каждый член суммы не обращаются в нуль. Следовательно,

$$(\eta - \eta') |\xi' \eta' c\rangle = 0, \quad (\eta - \eta') |\xi' r' d\rangle = 0,$$

так что все кет-векторы, которые имеются в правой части уравнения (47), являются собственными кет-векторами не только наблюдаемой  $\eta$ , но также и наблюдаемой  $\xi$ . Таким



образом, уравнение (47) дает разложение  $|\eta'\rangle$  по общим собственным кет-векторам наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$ . Поскольку любой кет может быть разложен по собственным кет-векторам  $|\eta'\rangle$  наблюдаемой  $\eta$ , то, следовательно, любой кет может быть разложен по общим собственным кет-векторам наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$ , и, таким образом, общие собственные кет-векторы образуют полную систему.

Рассмотренные выше общие собственные кет-векторы  $|\xi'\eta'c\rangle$  и  $|\xi'\eta'd\rangle$  наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$  имеют в качестве значков соответствующие собственные значения  $\xi'$ ,  $\eta'$  или  $\xi'$ ,  $\eta'$  этих наблюдаемых наряду со значками  $c$  и  $d$ , которые также могут оказаться необходимыми. Мы будем в основном придерживаться этих обозначений и в дальнейшем, снабжая общие собственные векторы в качестве значков соответствующими собственными значениями, точно так же, как мы делали это раньше для собственных векторов одной наблюдаемой.

Теорема, обратная доказанной выше, гласит: *если  $\xi$  и  $\eta$  — две наблюдаемые, общие собственные состояния которых образуют полную систему, то  $\xi$  и  $\eta$  коммутируют.* Для доказательства заметим, что если  $|\xi'\eta'\rangle$  — общий собственный кет-вектор с собственными значениями  $\xi'$  и  $\eta'$ , то

$$(\xi\eta - \eta\xi)|\xi'\eta'\rangle = (\xi'\eta' - \eta'\xi')|\xi'\eta'\rangle = 0. \quad (49)$$

Поскольку общие собственные состояния образуют полную систему, то произвольный кет  $|P\rangle$  может быть разложен по общим собственным кет-векторам  $|\xi'\eta'\rangle$ , для каждого из которых справедливо уравнение (49), следовательно,

$$(\xi\eta - \eta\xi)|P\rangle = 0,$$

и, таким образом,

$$\xi\eta - \eta\xi = 0.$$

Понятие об общих собственных состояниях может быть обобщено на случай, когда имеется не две, а большее число наблюдаемых. При этом доказанные выше прямая и обратная теоремы будут по-прежнему справедливы, т. е. если имеется ряд наблюдаемых, каждая из которых коммутирует со всеми остальными, то их общие собственные состояния образуют полную систему, и обратно. Те же самые рассуждения, которые использовались при доказательстве для случая двух переменных, пригодны и в общем случае.

Так, например, если мы имеем три коммутирующих наблюдаемых  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , то можно разложить общий собственный кет-вектор наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$  по собственным кет-векторам  $\zeta$ , а затем показать, что каждый из этих собственных кет-векторов является также собственным кет-вектором  $\xi$  и  $\eta$ . Таким образом, общий собственный кет-вектор наблюдаемых  $\xi$  и  $\eta$  можно разложить по общим собственным кет-векторам  $\xi$ ,  $\eta$  и  $\zeta$ , а так как любой кет может быть разложен по общим собственным кет-векторам  $\xi$  и  $\eta$ , то он может быть разложен также и по общим собственным векторам  $\xi$ ,  $\eta$  и  $\zeta$ .

Теорема ортогональности для общих собственных кет-векторов гласит, что два общих собственных вектора ряда коммутирующих наблюдаемых ортогональны, если соответствующие собственные значения обоих векторов отличаются хотя бы для одной наблюдаемой.

Благодаря тому, что общие собственные состояния двух или большего числа коммутирующих наблюдаемых образуют полную систему, мы можем построить теорию функций двух или большего числа коммутирующих наблюдаемых аналогично построенной в § 11 теории функций одной наблюдаемой. Если  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , ... — коммутирующие наблюдаемые, то общая функция  $f$  этих наблюдаемых определяется как линейный оператор, удовлетворяющий равенству

$$f(\xi, \eta, \zeta, \dots) |\xi' \eta' \zeta' \dots\rangle = f(\xi', \eta', \zeta', \dots) |\xi' \eta' \zeta' \dots\rangle, \quad (50)$$

где  $|\xi' \eta' \zeta'\rangle$  — общий собственный кет-вектор наблюдаемых  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , ... с собственными значениями  $\xi'$ ,  $\eta'$ ,  $\zeta'$ , ... Здесь  $f$  — любая функция  $f(a, b, c, \dots)$ , которая определена для всех тех значений  $a, b, c, \dots$ , которые являются соответственно собственными значениями наблюдаемых  $\xi, \eta, \zeta, \dots$ . Так же, как и для случая функции одной наблюдаемой, которая определялась условием (34), можно показать, что функция  $f(\xi, \eta, \zeta, \dots)$  полностью определяется условием (50), что

$$\overline{f(\xi, \eta, \zeta, \dots)} = f(\xi, \eta, \zeta, \dots)$$

в соответствии с формулой (37) и что если  $f(a, b, c, \dots)$  — вещественная функция, то  $f(\xi, \eta, \zeta, \dots)$  также вещественна и является наблюдаемой.

Далее мы можем обобщить формулы (45) и (46). Если заданы коммутирующие наблюдаемые  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , ..., то мы можем построить такую функцию от них, которая равна единице, если  $\xi = a$ ,  $\eta = b$ ,  $\zeta = c$ , ..., где  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... — вещественные числа, и равна нулю, если хоть одно из этих равенств не выполняется. Эта функция может быть записана в виде  $\delta_{\xi a} \delta_{\eta b} \delta_{\zeta c}$  ..., она и на самом деле равна произведению сомножителей  $\delta_{\xi a}$ ,  $\delta_{\eta b}$ ,  $\delta_{\zeta c}$ , ..., расположенных в любой последовательности, каждый из которых определен как функция от одной наблюдаемой. В том, что это так, легко убедиться, если подставить это произведение вместо  $f(\xi, \eta, \zeta, \dots)$  в левую часть формулы (50). Среднее значение этой функции для любого состояния будет равно вероятности  $P_{abc} \dots$  того, что наблюдаемые  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , ... имеют в этом состоянии соответственно значения  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... Таким образом, если состояние характеризуется нормированным кет-вектором  $|x\rangle$ , мы получаем из нашего основного предположения о физическом толковании, что

$$P_{abc} \dots = \langle x | \delta_{\xi a} \delta_{\eta b} \delta_{\zeta c} \dots | x \rangle. \quad (51)$$

$P_{abc} \dots$  равно нулю, если только хотя бы одно из чисел  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... не равно собственному значению соответствующей наблюдаемой. Если какое-нибудь из чисел  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... лежит в сплошном спектре собственных значений соответствующей переменной, то  $P_{abc} \dots$  будет, вообще говоря, также равно нулю; однако в случае сплошного спектра требование, чтобы эта наблюдаемая имела строго определенное значение, следует заменить требованием, чтобы она имела значение, лежащее в некоторой малой области, что означает замену одного из множителей  $\delta$  в (51) множителем, подобным  $\chi(\xi)$  в уравнении (46). Произведя такую замену для каждой из наблюдаемых  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , ..., для которой соответствующее численное значение  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... лежит в сплошном спектре собственных значений, мы получим вероятность, которая, вообще говоря, не обращается в нуль.

Если некоторые наблюдаемые коммутируют, то существуют состояния, в которых все эти наблюдаемые имеют определенные значения в том смысле, как это объясняется в конце стр. 68. Такими состояниями будут общие собственные состояния. Таким образом, *можно придать смысл тому, что различные коммутирующие наблюдаемые имеют одновременно определенные значения*. Далее из формулы (51) мы

видим, что для любого состояния можно придать смысл вероятности того, что при одновременном измерении различных коммутирующих наблюдаемых будет получен определенный результат. Это заключение представляет собой существенный шаг вперед. Вообще говоря, нельзя произвести наблюдение над системой, которая находится в определенном состоянии, не нарушив этого состояния и не испортив тем самым условия для второго наблюдения. Поэтому в общем случае нельзя придать никакого смысла двум наблюдениям, которые производят одновременно. Из сделанного выше заключения следует, что в частном случае, когда две наблюдаемые коммутируют, наблюдения следует считать совместимыми, т. е. не мешающими друг другу; это значит, что можно придать смысл двум наблюдениям, которые проводятся одновременно, и можно говорить о вероятности получения определенного результата. Такие два наблюдения можно в действительности считать одним наблюдением более сложного типа, результат которого выражается двумя числами вместо одного. С точки зрения общей теории, две или более коммутирующих наблюдаемых можно считать одной наблюдаемой, результат измерения которой состоит из двух или более чисел. Состояния, в которых это измерение наверняка приводит к определенному результату, являются совместными собственными состояниями.

### ГЛАВА III

## ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

### § 14. Базисные векторы

В предыдущих параграфах мы построили алгебраическую схему, в которой используются абстрактные величины трех родов, а именно бра-векторы, кет-векторы и линейные операторы; используя эти величины, мы сформулировали некоторые из основных законов квантовой механики. Можно было бы и далее развивать теорию с помощью этих абстрактных величин и использовать их в приложениях к конкретным задачам. Однако для ряда приложений более удобно заменить абстрактные величины числами или совокупностями чисел со сходными математическими свойствами и использовать далее эти совокупности чисел. Такой переход аналогичен использованию координат в геометрии и имеет то преимущество, что позволяет использовать более мощные математические методы для решения конкретных задач.

Способ, согласно которому абстрактные величины заменяются числами, не является единственным: имеется много способов соответственно тому, что в геометрии возможно построить много координатных систем. Каждый из таких способов мы назовем *представлением*, а совокупность чисел, заменяющих абстрактную величину, — *представителем* этой абстрактной величины в данном представлении. Таким образом, представитель абстрактной величины аналогичен координатам геометрического объекта. Если в квантовой механике нужно решить конкретную задачу, то можно значительно облегчить работу, выбрав представление так, чтобы представители существенных для данной задачи абстрактных величин имели наиболее простой вид.

Для того чтобы построить представление наиболее общим способом, рассмотрим полную систему бра-векторов

состояния такую, что произвольный бра-вектор может быть представлен в виде линейной комбинации бра-векторов этой последовательности (в виде суммы, интеграла или, быть может, в виде интеграла и суммы одновременно). Эти бра-векторы мы назовем *базисными бра-векторами* представления. Как мы увидим далее, они полностью определяют представление.

Рассмотрим произвольный кет  $|a\rangle$  и образуем скалярные произведения этого кет-вектора с каждым из базисных бра-векторов. Полученная таким образом совокупность чисел и является представителем кет-вектора  $|a\rangle$ . Эти числа определяют кет  $|a\rangle$  однозначно. Действительно, если имеется второй кет  $|a_1\rangle$ , для которого эти числа те же самые, то скалярное произведение разности  $|a\rangle - |a_1\rangle$  на каждый из базисных бра-векторов равно нулю. Следовательно, равно нулю скалярное произведение этой разности на любой бра-вектор и, таким образом, сама разность  $|a\rangle - |a_1\rangle$  также равна нулю.

Мы можем предположить, что базисные бра-векторы нумеруются с помощью одного или нескольких параметров  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , каждый из которых может принимать определенные численные значения. Тогда базисные бра-векторы можно записать в виде  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n |$ , а представитель кет-вектора  $|a\rangle$  запишется в виде  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | a \rangle$ . Любому возможному набору значений  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , где каждый из параметров пробегает все возможные для него значения, сопоставляется число, и совокупность всех этих чисел составляет представитель кет-вектора  $|a\rangle$ . Такая совокупность чисел образует *функцию* переменных  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . Таким образом, представитель кет-вектора можно рассматривать либо как совокупность чисел, либо как функцию тех переменных, которые используются для нумерации базисных бра-векторов.

Если число независимых состояний динамической системы конечно и равно  $n$ , то достаточно взять  $n$  базисных бра, которые можно занумеровать одним параметром, принимающим значения 1, 2, ... Тогда представитель любого кет-вектора  $|a\rangle$  состоит из  $n$  чисел  $\langle 1 | a \rangle, \langle 2 | a \rangle, \langle 3 | a \rangle, \dots, \langle n | a \rangle$ , которые как раз и являются, в обычном смысле слова, координатами вектора в данной системе координат. Понятие представителя кет-вектора является простым обобщением понятия координат обычного вектора и переходит

в это последнее, если число измерений в пространстве кет-векторов конечно.

В общем случае необязательно, чтобы все базисные бра-векторы, определяющие данное представление, были независимы. Однако для большинства представлений, которые практически используются, эти векторы независимы и удовлетворяют даже еще более жесткому условию — любые два базисных вектора ортогональны. Такое представление мы будем называть *ортогональным представлением*.

Рассмотрим ортогональное представление с базисными бра-векторами  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n |$ , нумерованными при помощи параметров  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , область изменения которых вещественна. Рассмотрим кет-вектор  $|a\rangle$  и составим представитель  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | a \rangle$ . Далее образуем числа  $\lambda_1 \langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | a \rangle$  и будем рассматривать их как представитель некоторого нового кет-вектора  $|b\rangle$ . Это допустимо, так как числа, образующие представитель этого кет-вектора, независимы, поскольку независимы базисные бра-векторы. Кет  $|b\rangle$  определяется уравнением

$$\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | b \rangle = \lambda_1 \langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | a \rangle.$$

Кет  $|b\rangle$ , очевидно, является линейной функцией кет-вектора  $|a\rangle$ , так что  $|b\rangle$  можно рассматривать как результат действия на  $|a\rangle$  некоторого линейного оператора. Обозначая этот оператор через  $L_1$ , имеем

$$|b\rangle = L_1 |a\rangle,$$

или

$$\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | L_1 | a \rangle = \lambda_1 \langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | a \rangle.$$

Это уравнение справедливо для произвольного кет-вектора  $|a\rangle$ , и, следовательно,

$$\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | L_1 = \lambda_1 \langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n |. \quad (1)$$

Уравнение (1) можно рассматривать как определение линейного оператора  $L_1$ . Из этого уравнения следует, что *каждый базисный бра-вектор является собственным бра-вектором оператора  $L_1$  с собственным значением, равным значению параметра  $\lambda_1$  для этого вектора*.

Из условия ортогональности базисных бра-векторов следует, как мы сейчас покажем, что оператор  $L_1$  веществен и является наблюдаемой. Пусть  $\lambda'_1, \lambda'_2, \dots, \lambda'_n$  и  $\lambda''_1, \lambda''_2, \dots, \lambda''_n$  — два набора значений параметров  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . Подставляя  $\lambda'$

вместо  $\lambda$  в уравнение (1) и умножая обе части справа на вектор  $|\lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u\rangle$ , сопряженный базисному бра-вектору  $\langle \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u |$ , имеем

$$\langle \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u | L_1 | \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u \rangle = \lambda'_1 \langle \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u | \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u \rangle.$$

Меняя местами  $\lambda'$  и  $\lambda''$ , получаем

$$\langle \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u | L_1 | \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u \rangle = \lambda''_1 \langle \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u | \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u \rangle.$$

Вследствие ортогональности базисных бра-векторов правые части этих формул обращаются в нуль, если только  $\lambda'_r$  не равны  $\lambda''_r$  для всех  $r$  от 1 до  $u$ ; в этом последнем случае правые части равны, а также вещественны, если только параметр  $\lambda_1$  веществен. Отсюда, а также используя уравнение (4) § 8, получаем

$$\begin{aligned} \langle \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u | L_1 | \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u \rangle &= \overline{\langle \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u | L_1 | \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u \rangle} = \\ &= \langle \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u | \bar{L}_1 | \lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u \rangle \end{aligned}$$

независимо от того, равны ли параметры  $\lambda'$  параметрам  $\lambda''$  или нет. Так как бра-векторы  $\langle \lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_u |$ , так же как и кет-векторы  $|\lambda''_1 \lambda''_2 \dots \lambda''_u\rangle$ , образуют полные системы, то мы можем заключить, что  $L_1 = \bar{L}_1$ . Другое условие, которое должно быть наложено на  $L_1$  для того, чтобы  $L_1$  было наблюдаемой, а именно условие полноты системы собственных состояний, очевидно, также выполняется, так как для оператора  $L_1$  собственными бра-векторами будут базисные бра-векторы, образующие полную систему.

Точно так же мы можем ввести операторы  $L_2, L_3, \dots, L_u$ , умножая  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_u | a \rangle$  по очереди на множители  $\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_u$  и рассматривая полученные совокупности чисел как представители векторов состояния. Далее можно показать, что эти операторы вещественны, являются наблюдаемыми и что их собственными бра-векторами являются базисные бра-векторы. Таким образом, базисные бра-векторы являются общими собственными бра-векторами всех операторов. Поскольку эти общие собственные бра-векторы образуют полную систему, из теоремы § 13 следует, что любые два из операторов  $L$  коммутируют.

Покажем далее, что если  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$  — любая совокупность коммутирующих наблюдаемых, то мы можем построить ортогональное представление, в котором базисными



*бра-векторами будут собственные бра-векторы операторов  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$ .* Допустим сначала, что каждому набору собственных значений  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u$  соответствует только один общий собственный бра-вектор. Тогда мы можем рассматривать эти общие собственные бра-векторы с произвольными численными коэффициентами как базисные бра-векторы. Все они ортогональны согласно теореме ортогональности (любая пара бра-векторов будет иметь неодинаковые собственные значения хотя бы для одной из наблюдаемых, откуда и следует ортогональность). Из результатов § 13 следует, что бра-векторы образуют полную систему. Естественно характеризовать эти бра-векторы с помощью соответствующих собственных значений  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u$ , так что они могут быть записаны в виде  $\langle \xi'_1 \xi'_2 \dots \xi'_u |$ .

Переходя теперь к общему случаю, когда для некоторых наборов собственных значений наблюдаемые  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$  имеют несколько независимых общих собственных бра-векторов, мы должны из всех общих собственных бра-векторов с одними и теми же собственными значениями  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u$  отобрать полную подсистему, члены которой ортогональны между собой. Условие полноты означает в данном случае, что любой собственный бра-вектор с собственными значениями  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u$  может быть линейно выражен через члены этой подсистемы. Мы должны сделать это для каждого набора собственных значений  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u$ , объединить затем все члены всех этих подсистем и взять их в качестве базисных бра-векторов представления. Все эти бра-векторы ортогональны между собой. Действительно, если два таких бра-вектора имеют неодинаковые наборы собственных значений, то они ортогональны согласно теореме ортогональности, а если все собственные значения одинаковы, то они ортогональны по самому способу построения. Все вместе эти бра-векторы образуют полную систему бра-векторов, поскольку любой бра-вектор может быть линейно выражен через общие собственные бра-векторы, а каждый общий собственный бра-вектор линейно выражается через бра-векторы построенных нами подсистем. Имеется бесконечно много способов выбора этих подсистем, и каждый из способов приводит к своему ортогональному представлению.

Для обозначения базисных бра-векторов в этом общем случае, мы можем использовать собственные значения  $\xi'_1,$

$\xi'_2, \dots, \xi'_u$  каждого вектора, а также некоторые дополнительные вещественные переменные  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_v$ , которые необходимы для того, чтобы отличать один от другого векторы, имеющие одинаковые наборы собственных значений. Базисные бра-векторы запишутся тогда в виде  $\langle \xi'_1 \xi'_2 \dots \xi'_u \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_v |$ . Каждой из переменных  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_v$  можно сопоставить соответственно линейные операторы  $L_1, L_2, \dots, L_v$  с помощью уравнения, аналогичного (1). Далее можно показать, что собственными бра-векторами этих линейных операторов являются базисные бра-векторы, что операторы вещественны и являются наблюдаемыми и что они коммутируют между собой и с операторами  $\xi$ . Тогда базисные бра-векторы будут общими собственными векторами всех коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u, L_1, L_2, \dots, L_v$ .

Будем называть *полным набором коммутирующих наблюдаемых* такую совокупность наблюдаемых, в которой все они коммутируют друг с другом и для которой каждому набору собственных значений соответствует только одно общее собственное состояние. Согласно этому определению наблюдаемые  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u, L_1, L_2, \dots, L_v$  образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, так как собственные значения  $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_u, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_v$  имеются только у одного собственного бра-вектора — у соответствующего базисного бра-вектора. Точно так же наблюдаемые  $L_1, L_2, \dots, L_u$ , которые определены в уравнении (1) и далее, образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых. С помощью данного определения основные результаты этого параграфа могут быть кратко сформулированы следующим образом.

I. Базисные бра-векторы ортогонального представления являются общими собственными бра-векторами полного набора коммутирующих наблюдаемых.

II. Если задан полный набор коммутирующих наблюдаемых, то мы можем построить ортогональное представление, базисными бра-векторами которого являются общие собственные бра-векторы этих наблюдаемых.

III. Любая совокупность коммутирующих наблюдаемых может быть дополнена до полного набора путем добавления к ней новых наблюдаемых.

IV. Удобно нумеровать базисные бра-векторы ортогонального представления при помощи собственных значений полного набора коммутирующих наблюдаемых, для кото-

рого каждый базисный бра-вектор является общим собственным бра-вектором.

Векторы, сопряженные базисным бра-векторам представления, мы будем называть *базисными кет-векторами* представления. Таким образом, если обозначать базисные бра-векторы  $\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n |$ , то обозначение для базисных кет-векторов будет  $| \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n \rangle$ . Представитель бра-вектора  $\langle b |$  определяется значениями скалярных произведений бра-вектора  $\langle b |$  на каждый из базисных кет-векторов, т. е. числами  $\langle b | \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n \rangle$ . Этот представитель, так же как и представитель кет-вектора, можно рассматривать либо как последовательность чисел, либо как функцию переменных  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . Далее имеем

$$\langle b | \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n \rangle = \overline{\langle \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n | b \rangle},$$

т. е. если кет-вектор и бра-вектор являются сопряженными, то их представители являются комплексно-сопряженными. В случае ортогонального представления, когда базисные бра-векторы являются общими собственными бра-векторами полного набора коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ , базисные кет-векторы будут общими собственными кет-векторами тех же наблюдаемых.

До сих пор мы не рассматривали длин базисных векторов. Для ортогональных представлений наиболее естественно нормировать базисные векторы, а не считать их длину произвольной; таким образом, мы делаем еще один шаг, упрощающий представления. Однако это возможно сделать, если только все параметры, определяющие базисные векторы, могут принимать лишь дискретные значения. Если хоть один из этих параметров меняется непрерывно и может принимать любые значения в некотором интервале, то базисные векторы являются собственными векторами такой наблюдаемой, которая имеет сплошной спектр собственных значений. В таком случае, как это следует из рассуждений в § 10, базисные векторы имеют бесконечную длину. Тогда необходим какой-то иной метод, позволяющий фиксировать те численные множители, на которые следует умножить базисные векторы. Для того чтобы прийти к удобному методу рассмотрения этого вопроса, требуются новые математические понятия и обозначения, которые будут введены в следующем параграфе.

### § 15. Дельта-функция

Рассуждения в § 10 привели нас к рассмотрению величин, содержащих различные типы бесконечностей. Для того чтобы иметь точные обозначения, позволяющие оперировать с этими бесконечностями, мы введем зависящую от параметра  $x$  величину  $\delta(x)$ , которая удовлетворяет условиям

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx &= 1, \\ \delta(x) &= 0 \quad \text{при } x \neq 0. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Для того чтобы получить наглядное представление о  $\delta(x)$ , рассмотрим функцию вещественной переменной  $x$ , которая обращается в нуль повсюду, за исключением малого промежутка длины  $\varepsilon$ , внутри которого находится точка  $x = 0$ , причем внутри этого промежутка функция настолько велика, что интеграл от нее по промежутку равен единице. Точное поведение функции внутри этого промежутка несущественно; предполагается только, что она не меняется там чересчур быстро (например, можно считать, что функция всегда имеет порядок  $\varepsilon^{-1}$ ). Тогда в пределе при  $\varepsilon \rightarrow 0$  эта функция перейдет в  $\delta(x)$ .

Дельта-функция  $\delta(x)$  не является функцией от  $x$  в соответствии с обычным математическим определением функции, когда требуется чтобы функция имела определенное значение для любого значения аргумента. Чтобы отметить отличие от обычного определения функции, можно назвать такую величину, как  $\delta(x)$  «несобственной функцией». Таким образом,  $\delta(x)$  не является такой величиной, которую можно было бы использовать повсюду в математическом анализе; ее применение должно быть ограничено некоторыми простыми типами математических выражений, для которых это применение наверняка не приводит к противоречиям.

Наиболее важное свойство  $\delta(x)$  демонстрируется следующим уравнением:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0), \quad (3)$$

где  $f(x)$  — произвольная непрерывная функция от  $x$ . Легко убедиться, что это свойство следует из рассмотренного выше

наглядного представления о  $\delta(x)$ . Левая часть уравнения (3) может зависеть только от тех значений  $f(x)$ , для которых аргумент  $x$  близок к нулю, так что мы, без существенной погрешности, можем заменить  $f(x)$  на ее значение в нуле  $f(0)$ . Тогда уравнение (3) является следствием первого из уравнений (2). Переноса в формуле (3) начало координат, мы получаем формулу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a), \quad (4)$$

где  $a$  — вещественное число. Таким образом, операция умножения функции от  $x$  на  $\delta(x-a)$  и интегрирования по всем значениям  $x$  эквивалентна замене  $x$  на  $a$ . Этот общий результат справедлив также, если функция от  $x$  не есть просто численная функция, а является вектором или линейным оператором, зависящим от  $x$ .

Область интегрирования в формулах (3), (4) не обязательно должна быть от  $-\infty$  до  $\infty$ , достаточно чтобы эта область включала в себя особую точку, в которой дельта-функция не обращается в нуль. В дальнейшем пределы интегрирования будут в таких уравнениях обычно опускаться; при этом будет подразумеваться, что область интегрирования удовлетворяет нужным условиям.

Из уравнений (3), (4) видно, что хотя несобственная функция и не имеет строго определенных значений, но если она содержится в качестве множителя в подынтегральном выражении, то сам интеграл имеет строго определенное значение. Квантовая теория такова, что где бы ни появлялась несобственная функция, в конечном счете она всегда войдет в подынтегральное выражение. Можно было бы сформулировать всю теорию так, чтобы несобственные функции всегда стояли под интегралом. Тогда можно было бы вообще исключить несобственные функции. Таким образом, использование несобственных функций вовсе не означает, что теория является недостаточно строгой; это есть просто удобный способ обозначений, позволяющий нам выразить в краткой форме такие соотношения, которые, если необходимо, можно было бы записать и без несобственных функций, но в более громоздком виде, который затемнял бы смысл наших рассуждений.

Можно предложить и другой способ определения дельта-функции, а именно, ее можно рассматривать как производ-

ную  $\theta'(x)$  от функции  $\theta(x)$ , определенной следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \theta(x) &= 0 & (x < 0), \\ \theta(x) &= 1 & (x > 0). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Легко убедиться, что это определение эквивалентно предыдущему, если подставить  $\theta'(x)$  вместо  $\delta(x)$  в левую часть формулы (3) и произвести интегрирование по частям. Считая, что  $g_1$  и  $g_2$  — положительные числа, получаем

$$\begin{aligned} \int_{-g_2}^{g_1} f(x) \theta'(x) dx &= [f(x) \theta(x)]_{-g_2}^{g_1} - \int_{-g_2}^{g_1} f'(x) \theta(x) dx = \\ &= f(g_1) - \int_0^{g_1} f'(x) dx = f(0), \end{aligned}$$

т. е. получаем согласие с формулой (3). Дельта-функция появляется всегда, если дифференцировать разрывные функции.

Можно написать ряд элементарных уравнений, выражающих свойства дельта-функции. Эти уравнения представляют собой правила обращения с математическими выражениями, содержащими дельта-функции. Смысл каждого из таких уравнений заключается в том, что если в подынтегральное выражение в качестве множителя входит одна из сторон уравнения, то ее можно заменить другой стороной, значение интеграла при этом не изменится.

Приведем некоторые из таких уравнений:

$$\delta(-x) = \delta(x), \quad (6)$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (7)$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\delta(x) \quad (a > 0), \quad (8)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2} a^{-1} \{\delta(x - a) + \delta(x + a)\} \quad (a > 0), \quad (9)$$

$$\int \delta(a - x) dx \delta(x - b) = \delta(a - b), \quad (10)$$

$$f(x) \delta(x - a) = f(a) \delta(x - a). \quad (11)$$

Уравнение (6) означает только то, что  $\delta(x)$  — четная функция от  $x$ , что очевидно. Чтобы доказать справедливость уравнения (7), рассмотрим произвольную непрерывную

функцию  $f(a)$  от  $a$ . Тогда, согласно формуле (3),

$$\int f(x) x \delta(x) dx = 0.$$

Таким образом, множитель  $x \delta(x)$  в подынтегральном выражении эквивалентен нулю; а смысл уравнения (3) как раз и эквивалентен этому утверждению. Справедливость уравнений (8) и (9) может быть доказана с помощью аналогичных элементарных рассуждений. Чтобы доказать справедливость уравнения (10), рассмотрим непрерывную функцию  $f(a)$  от переменной  $a$ . Тогда

$$\begin{aligned} \int f(a) da \int \delta(a-x) dx \delta(x-b) &= \\ &= \int \delta(x-b) dx \int f(a) da \delta(a-x) = \\ &= \int \delta(x-b) dx f(x) = \int f(a) da \delta(a-b). \end{aligned}$$

Таким образом, обе стороны уравнения (10), рассматриваемые как множители в подынтегральном выражении, эквивалентны, если только считать, что  $a$  есть переменная интегрирования. Тем же путем может быть доказана справедливость равенства (10) для случая, когда обе части его стоят под интегралом с переменной интегрирования  $b$ , так что уравнение (10) можно рассматривать с любой из этих точек зрения. Справедливость уравнения (11), рассматриваемого с этих двух точек зрения, также легко доказать с помощью формулы (4).

Уравнение (10) можно рассматривать как частный случай формулы (4), когда  $f(x) = \delta(x-b)$ . Здесь мы имеем пример того, что часто оказывается возможным рассматривать несобственную функцию так, как если бы она была обычной непрерывной функцией, не приходя при этом к противоречиям и ошибкам.

Из уравнения (7) следует, что если обе части уравнения разделить на переменную  $x$ , которая может принимать значение нуль, то следует прибавить к одной из частей дельта-функцию  $\delta(x)$ , умноженную на произвольную величину; т. е. из уравнения

$$A = B \tag{12}$$

не следует, что

$$\frac{A}{x} = \frac{B}{x}$$

а только то, что

$$\frac{A}{x} = \frac{B}{x} + c\delta(x), \quad (13)$$

где  $c$  — неизвестная величина.

В качестве примера применения дельта-функции рассмотрим дифференцирование  $\log x$ . Обычная формула

$$\frac{d}{dx} \log x = \frac{1}{x} \quad (14)$$

требует дополнительного рассмотрения в окрестности точки  $x = 0$ . Для того чтобы определить более точно функцию  $1/x$  в окрестности точки  $x = 0$  (в смысле несобственных функций), следует ввести дополнительное условие, например, что интеграл этой функции от  $-\varepsilon$  до  $\varepsilon$  равен нулю. Если учесть это дополнительное условие, то интеграл правой части уравнения (14) от  $-\varepsilon$  до  $\varepsilon$  равен нулю, тогда как тот же интеграл от левой части равен  $\log(-1)$ , и, таким образом, уравнение (14) не является правильным. Для того чтобы его исправить, заметим, что если брать основное значение  $\log x$ , то он имеет для отрицательных значений  $x$  чисто-мнимую добавку  $i\pi$ . При переходе переменной  $x$  через нуль этот член исчезает разрывным образом. Дифференцирование этого чисто-мнимого члена даст нам результат  $-i\pi\delta(x)$ , так что формулу (14) следует записать в виде

$$\frac{d}{dx} \log x = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x). \quad (15)$$

Такая комбинация функции  $\frac{1}{x}$  и дельта-функции, которая получилась в правой части формулы (15), играет важную роль в квантовой теории столкновений (см. § 50).

## § 16. Свойства базисных векторов

Используя введенную нами дельта-функцию, мы можем продолжить построение теории представлений. Предположим сначала, что имеется одна наблюдаемая  $\xi$ , которая сама по себе образует полный коммутирующий «набор», условием чего является то, что каждому собственному значению  $\xi'$  соответствует только одно собственное состояние наблюдаемой  $\xi$ . Построим ортогональное представление, базисными векторами которого будут собственные векторы наблюдаемой  $\xi$ , т. е.  $\langle \xi' |$  и  $| \xi' \rangle$ .



В случае, когда собственные значения  $\xi$  дискретны, мы можем нормировать базисные векторы. Тогда

$$\begin{aligned}\langle \xi' | \xi'' \rangle &= 0 \quad (\xi' \neq \xi''), \\ \langle \xi' | \xi' \rangle &= 1.\end{aligned}$$

Эти уравнения можно объединить в одно

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta_{\xi' \xi''}. \quad (16)$$

где символ  $\delta$  с двумя значками, который мы будем в дальнейшем часто использовать, имеет смысл

$$\left. \begin{aligned} \delta_{rs} &= 0, & \text{если } r \neq s, \\ \delta_{rs} &= 1, & \text{если } r = s. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

В случае, когда собственные значения  $\xi$  непрерывны, мы не можем нормировать базисные векторы. Если теперь рассмотреть величину  $\langle \xi' | \xi'' \rangle$ , где параметр  $\xi'$  фиксирован, а параметр  $\xi''$  считается переменным, то из рассуждений, связанных с выражением (29) § 10, следует, что эта величина исчезает для  $\xi'' \neq \xi'$  и что интеграл от нее по  $\xi''$  по области, включающей в себя  $\xi'$ , конечен. Пусть этот интеграл равен  $c$ ; тогда

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c \delta(\xi' - \xi'').$$

Согласно формуле (30) § 10,  $c$  — положительное число. Оно может зависеть от  $\xi'$ , так что мы будем писать  $c(\xi')$  или, для краткости,  $c'$ . Таким образом,

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c' \delta(\xi' - \xi''). \quad (18)$$

Вместо этого можно написать

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c'' \delta(\xi' - \xi''), \quad (19)$$

где  $c''$  — краткое обозначение для  $c(\xi'')$ , а правые части формул (18) и (19) равны согласно уравнению (11).

Перейдем к другому представлению, базисными векторами которого будут собственные векторы наблюдаемой  $\xi$ ; новые базисные векторы будут отличаться от старых лишь численным множителем. Обозначим новые базисные векторы  $\langle \xi'^* |$ ,  $| \xi'^* \rangle$  дополнительным значком  $*$ , который введем для того, чтобы отличать их от старых базисных векторов. Тогда

$$\langle \xi'^* | = k' \langle \xi' |, \quad | \xi'^* \rangle = \bar{k}' | \xi' \rangle,$$

где  $k'$  — краткое обозначение для  $k(\xi')$ , величина, зависящая от  $\xi'$ . Получаем, используя формулу (18),

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = k' \bar{k}'' \langle \xi' | \xi'' \rangle = k' \bar{k}'' c' \delta(\xi' - \xi'').$$

Это же равенство, согласно уравнению (11), можно записать в виде

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = k' \bar{k}'' c' \delta(\xi' - \xi'').$$

Выбирая  $k'$  так, чтобы его модуль был равен  $c'^{-1/2}$  (что возможно, так как  $c'$  положительно), мы можем получить

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = \delta(\xi' - \xi''). \quad (20)$$

Длины новых базисных векторов теперь фиксированы так, чтобы сделать представление возможно более простым. Тот метод, с помощью которого эти длины были фиксированы, в известном смысле аналогичен методу нормировки базисных векторов в случае дискретных значений  $\xi'$ ; в самом деле, уравнение (20) и уравнение (16) аналогичны, в одном в правой части стоит функция  $\delta(\xi' - \xi'')$ , а в другом аналогичный символ  $\delta_{\xi' \xi''}$ . Мы будем применять в дальнейшем новое представление, опуская для краткости значок \*. Тогда уравнение (20) примет вид

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''). \quad (21)$$

Далее развитие теории для дискретного и для сплошного спектров собственных значений  $\xi$  можно вести параллельно. Так, для дискретного спектра, используя уравнение (16), имеем

$$\sum_{\xi'} |\xi'\rangle \langle \xi' | \xi'' \rangle = \sum_{\xi'} |\xi'\rangle \delta_{\xi' \xi''} = |\xi''\rangle,$$

где суммирование производится по всем собственным значениям. Это уравнение справедливо для любого базисного кет-вектора  $|\xi''\rangle$ ; отсюда, учитывая, что базисные кет-векторы образуют полную систему, получаем

$$\sum_{\xi'} |\xi'\rangle \langle \xi' | = 1. \quad (22)$$

Это — полезное уравнение, выражающее важное свойство базисных векторов, а именно, если  $|\xi'\rangle$  умножить справа на  $\langle \xi' |$  и просуммировать по всем  $\xi'$ , то мы получаем единичный оператор. Уравнения (16) и (22) выражают основ-

ные свойства базисных векторов для случая, когда спектр собственных значений  $\xi$  дискретен.

Аналогично для случая сплошного спектра  $\xi$ , используя уравнение (21), получаем

$$\int |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi' | \xi'' \rangle = \int |\xi'\rangle d\xi' \delta(\xi' - \xi'') = |\xi''\rangle. \quad (23)$$

Здесь использована формула (4), где вместо функции  $f(x)$  подставлен кет-вектор состояния, а интегрирование производится по всей области изменения собственных значений. Уравнение (23) справедливо для любого базисного кет-вектора  $|\xi''\rangle$  и, следовательно,

$$\int |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi' | = 1. \quad (24)$$

Отличие этой формулы от формулы (22) состоит лишь в том, что здесь сумма заменена интегралом. Уравнения (21) и (24) выражают основные свойства базисных векторов для случая сплошного спектра собственных значений.

Уравнения (22) и (24) позволяют произвести разложение любого бра-вектора или кет-вектора по базисным векторам. Например, для кет-вектора  $|P\rangle$  в случае дискретного спектра путем умножения формулы (22) справа на  $|P\rangle$  получаем уравнение

$$|P\rangle = \sum_{\xi'} |\xi'\rangle \langle \xi' | P \rangle, \quad (25)$$

т. е. разложение вектора  $|P\rangle$  по векторам  $|\xi'\rangle$ , причем коэффициентами разложения являются числа  $\langle \xi' | P \rangle$ , совокупность которых и является представителем вектора  $|P\rangle$ . Аналогично в случае сплошного спектра получаем

$$|P\rangle = \int |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi' | P \rangle, \quad (26)$$

т. е. разложение вектора  $|P\rangle$  в интеграл по векторам  $|\xi'\rangle$ , причем коэффициентом в подынтегральном выражении разложения будет опять-таки представитель  $\langle \xi' | P \rangle$  вектора  $|P\rangle$ . Уравнения, сопряженные уравнениям (25) и (26), дадут разложение бра-вектора  $\langle P |$  по базисным бра-векторам.

Математический метод, которым мы сейчас пользуемся, позволяет нам в случае сплошного спектра разложить произвольный кет в интеграл по собственным кет-векторам наблюдаемой  $\xi$ . Если же не использовать понятие дельта-

функции, то разложение произвольного кет-вектора состояло бы, вообще говоря, из интеграла и суммы, как, например, в уравнении (25) § 10. Дельта-функция позволяет нам заменить эту сумму интегралом, подынтегральное выражение будет состоять тогда из членов, каждый из которых содержит в качестве множителя дельта-функцию. Например, собственный кет-вектор  $|\xi''\rangle$  можно представить в виде интеграла по всем собственным кет-векторам, как это видно из второго равенства в формуле (23).

Если  $\langle Q |$  и  $| P \rangle$  — произвольные бра и кет, то, используя снова формулы (22) и (24), получаем

$$\langle Q | P \rangle = \sum_{\xi'} \langle Q | \xi' \rangle \langle \xi' | P \rangle \quad (27)$$

для случая дискретного спектра и

$$\langle Q | P \rangle = \int \langle Q | \xi' \rangle d\xi' \langle \xi' | P \rangle \quad (28)$$

для сплошного спектра  $\xi$ . Эти уравнения выражают скалярное произведение  $\langle Q |$  и  $| P \rangle$  через их представителей  $\langle Q | \xi' \rangle$  и  $\langle \xi' | P \rangle$ . Уравнение (27) совпадает с обычной формулой для скалярного произведения двух векторов, выраженного через их координаты, а уравнение (28) является естественным обобщением этой формулы на случай сплошного спектра  $\xi$  — сумма заменена в этом случае интегралом.

Обобщение предыдущих рассуждений на случай, когда  $\xi$  имеет как дискретный, так и сплошной спектры собственных значений, не представляет затруднений. Если ввести обозначения  $\xi^r$ ,  $\xi^s$  для дискретных и  $\xi'$ ,  $\xi''$  для сплошных собственных значений, то мы получим уравнения

$$\langle \xi^r | \xi^s \rangle = \delta_{\xi^r \xi^s}, \quad \langle \xi^r | \xi' \rangle = 0, \quad \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''), \quad (29)$$

являющиеся обобщением уравнений (16) и (21). Эти уравнения выражают тот факт, что все базисные векторы ортогональны, что принадлежащие к дискретному спектру векторы нормированы, а длина векторов, принадлежащих к сплошному спектру, определяется теми же правилами, которые привели нас к формуле (20). Из формул (29) можно получить обобщение формул (22) и (24)

$$\sum_{\xi^r} |\xi^r\rangle \langle \xi^r| + \int |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi'| = 1, \quad (30)$$

причем интегрирование производится по всему сплошному спектру собственных значений. Используя формулу (30), получаем немедленно

$$|P\rangle = \sum_{\xi'} |\xi'\rangle \langle \xi' | P \rangle + \int |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi' | P \rangle, \quad (31)$$

т. е. обобщение формул (25) и (26), а также

$$\langle Q | P \rangle = \sum_{\xi'} \langle Q | \xi' \rangle \langle \xi' | P \rangle + \int \langle Q | \xi' \rangle d\xi' \langle \xi' | P \rangle \quad (32)$$

— обобщение формул (27) и (28).

Перейдем теперь к общему случаю, когда имеется несколько коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$ , образующих полный набор, и построим ортогональное представление, базисными векторами которого будут общие собственные векторы всех этих наблюдаемых. Будем обозначать базисные векторы  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u |$  и  $| \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle$ . Предположим, что наблюдаемые  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_v$  ( $v \leq u$ ) имеют дискретный спектр собственных значений, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  — сплошной.

Рассмотрим величину  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_v \xi''_{v+1} \dots \xi'_u | \xi'_1 \dots \xi''_{v+1} \dots \xi''_u \rangle$ . Из теоремы ортогональности следует, что эта величина равна нулю, если не выполняется хотя бы одно из условий  $\xi'_s = \xi''_s$  для  $s = v+1, \dots, u$ . Обобщая рассуждения, связанные с выражением (29) § 10, на случай общих собственных векторов нескольких наблюдаемых, и обобщая также аксиому (30) § 10, находим, что  $(u-v)$ -кратный интеграл от этой величины по каждому из собственных значений  $\xi''_s$  является положительным числом, если областью интегрирования является весь сплошной спектр каждого из собственных значений, так что все  $\xi'_s$  лежат внутри области. Обозначая это число через  $c'$ , где ' означает, что оно является функцией от  $\xi'_1, \dots, \xi'_v, \xi'_{v+1}, \dots, \xi'_u$ , мы можем сформулировать наш результат в виде уравнения

$$\begin{aligned} \langle \xi'_1 \dots \xi'_v \xi''_{v+1} \dots \xi'_u | \xi'_1 \dots \xi''_{v+1} \dots \xi''_u \rangle = \\ = c' \delta(\xi'_{v+1} - \xi''_{v+1}) \dots \delta(\xi'_u - \xi''_u), \end{aligned} \quad (33)$$

где в правой части имеется по одному множителю с дельта-функцией для каждого значения  $s$  от  $v+1$  до  $u$ . Далее, мы изменим длины наших базисных векторов так, чтобы сделать множитель  $c'$  равным единице, подобно тому, как это было сделано в формуле (20). Используя снова теорему

ортогональности, получаем окончательно

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle = \delta_{\xi'_1 \xi''_1} \dots \delta_{\xi'_v \xi''_v} \delta(\xi'_{v+1} - \xi''_{v+1}) \dots \delta(\xi'_u - \xi''_u), \quad (34)$$

причем в правой части стоит по двухзначковому символу  $\delta$  для каждой из наблюдаемых  $\xi$  с дискретным спектром собственных значений и по дельта-функции для каждой из наблюдаемых  $\xi$  со сплошным спектром. Это уравнение является обобщением уравнений (16) и (21) на случай, когда полная совокупность состоит из нескольких наблюдаемых.

Из формулы (34) получается обобщение формул (22) и (24)

$$\sum_{\xi'_1 \dots \xi'_v} \int \dots \int |\xi'_1 \dots \xi'_u\rangle d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u \langle \xi'_1 \dots \xi'_u| = 1, \quad (35)$$

где интегрирование производится по всем переменным собственным значениям  $\xi'$  сплошного спектра, а суммирование — по всем собственным значениям  $\xi'$  дискретного спектра. Уравнения (34) и (35) выражают основные свойства базисных векторов для данного случая. Используя формулу (35), мы можем немедленно написать обобщения формул (25) или (26) и (27) или (28).

Случай, который мы только что рассмотрели, можно обобщить, считая, что некоторые из наблюдаемых имеют как дискретный, так и сплошной спектры собственных значений. Соответствующие изменения в уравнениях вполне очевидны, однако мы не будем их здесь приводить, так как довольно затруднительно записать их в общем виде.

Существуют некоторые задачи, для которых оказывается более удобным не полагать число  $c'$  в уравнении (34) равным единице, а считать его некоторой заданной функцией от переменных  $\xi'$ . Обозначая эту функцию через  $\rho'^{-1}$ , получаем вместо формулы (34)

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle = \rho'^{-1} \delta_{\xi'_1 \xi''_1} \dots \delta_{\xi'_v \xi''_v} \delta(\xi'_{v+1} - \xi''_{v+1}) \dots \delta(\xi'_u - \xi''_u), \quad (36)$$

а вместо формулы (35) имеем

$$\sum_{\xi'_1 \dots \xi'_v} \int \dots \int |\xi'_1 \dots \xi'_u\rangle \rho' d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u \langle \xi'_1 \dots \xi'_u| = 1. \quad (37)$$

Функция  $\rho'$  называется *весовой функцией* представления, величина  $\rho' d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u$  является «весом», который приписывается малому элементу объема в пространстве переменных  $\xi'_{v+1}, \dots, \xi'_u$ .

Все представления, которые мы рассматривали ранее, имели весовую функцию, равную единице. Введение отличной от единицы весовой функции является исключительно вопросом удобства и ничего не прибавляет к математическим возможностям аппарата представлений. Легко убедиться, что базисные бра-векторы  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u |$  представления с весовой функцией  $\rho'$  связаны простым соотношением с базисными бра-векторами  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u |$  соответствующего представления с единичной весовой функцией

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | = \rho'^{-1/2} \langle \xi'_1 \dots \xi'_u |. \quad (38)$$

Примером такого удобного представления с неединичной весовой функцией является случай, когда двумя наблюдаемыми являются полярный и азимутальный углы  $\theta$  и  $\phi$ , определяющие направление в трехмерном пространстве. Тогда удобно положить  $\rho' = \sin \theta'$  так, чтобы в формулу (37) под интеграл вошел множитель  $\sin \theta' d\theta' d\phi'$ , т. е. элемент телесного угла.

## § 17. Представление линейных операторов

В § 14 мы определили, каким образом можно представить кет-векторы и бра-векторы с помощью совокупностей чисел. Теперь нам следует сделать то же для линейных операторов, для того чтобы иметь законченную схему для представления всех наших абстрактных величин совокупностями чисел. Те же самые базисные векторы, которые мы рассматривали в § 14, могут быть снова использованы для этой цели.

Допустим, что базисные векторы являются общими собственными векторами полного набора коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$ . Если  $\alpha$  — некоторый линейный оператор, то мы можем взять любой из базисных бра-векторов  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u |$  и любой из базисных кет-векторов  $|\xi'_1 \dots \xi'_u\rangle$  и составить из них числа

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \alpha | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle. \quad (39)$$

Этих чисел достаточно для полного определения оператора  $\alpha$ , так как они прежде всего определяют кет  $\alpha | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle$  (по-

скольку они образуют представитель этого кет-вектора), а значение этого вектора для всех базисных кет-векторов  $|\xi^1 \dots \xi^n\rangle$  определяет  $\alpha$ . Совокупность чисел (39) мы будем называть представителем линейного оператора  $\alpha$  или динамической переменной  $\alpha$ . Эта совокупность более сложна, чем представители кет-векторов или бра-векторов, так как она зависит от параметров, характеризующих два базисных вектора, а не один.

Рассмотрим совокупность этих чисел в простейших случаях. Предположим сначала, что наблюдаемая  $\xi$  сама образует полный коммутирующий набор, и что эта наблюдаемая имеет дискретный спектр собственных значений  $\xi'$ . Представителем оператора  $\alpha$  будет тогда дискретная совокупность чисел  $\langle \xi' | \alpha | \xi'' \rangle$ . Если бы потребовалось выписать эти числа в явном виде, то было бы естественно расположить их в виде двумерной таблицы, т. е. в виде

$$\begin{pmatrix} \langle \xi^1 | \alpha | \xi^1 \rangle & \langle \xi^1 | \alpha | \xi^2 \rangle & \langle \xi^1 | \alpha | \xi^3 \rangle & \dots \\ \langle \xi^2 | \alpha | \xi^1 \rangle & \langle \xi^2 | \alpha | \xi^2 \rangle & \langle \xi^2 | \alpha | \xi^3 \rangle & \dots \\ \langle \xi^3 | \alpha | \xi^1 \rangle & \langle \xi^3 | \alpha | \xi^2 \rangle & \langle \xi^3 | \alpha | \xi^3 \rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (40)$$

где  $\xi^1, \xi^2, \xi^3, \dots$  — все собственные значения наблюдаемой  $\xi$ . Такая таблица называется *матрицей*, а числа — *матричными элементами*. Мы условимся, что элементы будут всегда расположены так, чтобы определенному номеру строки соответствовал определенный базисный бра-вектор; а столбцу с тем же номером — соответствующий сопряженный базисный кет-вектор.

Элемент  $\langle \xi' | \alpha | \xi' \rangle$ , соответствующий двум базисным векторам с одинаковыми индексами, называется *диагональным матричным элементом*, поскольку все такие элементы расположены по диагонали матрицы. Если положить  $\alpha$  равным единице, то из уравнения (16) следует, что все диагональные матричные элементы равны единице, а все остальные — нулю. Такая матрица называется *единичной матрицей*.

Если оператор  $\alpha$  веществен, то мы имеем

$$\langle \xi' | \alpha | \xi'' \rangle = \overline{\langle \xi'' | \alpha | \xi' \rangle}. \quad (41)$$

Из этого условия следует, что в матрице (40) диагональные матричные элементы должны быть вещественны, а пары



недиагональных элементов, симметричных относительно диагонали, являются комплексно-сопряженными друг другу. Матрица, удовлетворяющая такому условию, называется *эрмитовой матрицей*.

Если положить  $\alpha$  равным  $\xi$ , то произвольный элемент матрицы будет иметь вид

$$\langle \xi' | \xi | \xi'' \rangle = \xi' \langle \xi' | \xi'' \rangle = \xi' \delta_{\xi' \xi''}. \quad (42)$$

Таким образом, все недиагональные матричные элементы равны нулю. Такая матрица называется *диагональной матрицей*. Ее диагональными элементами являются как раз собственные значения наблюдаемой  $\xi$ . В более общем случае, если полагать  $\alpha$  равным функции  $f(\xi)$  от  $\xi$ , получаем

$$\langle \xi' | f(\xi) | \xi'' \rangle = f(\xi') \delta_{\xi' \xi''} \quad (43)$$

и матрица опять-таки будет диагональной.

Определим, какой вид будет иметь представитель произведения  $\alpha\beta$  двух линейных операторов  $\alpha$  и  $\beta$ , если известны представители каждого из сомножителей. Используя уравнение (22), в котором  $\xi'$  заменено на  $\xi'''$ , получаем

$$\begin{aligned} \langle \xi' | \alpha\beta | \xi'' \rangle &= \langle \xi' | \alpha \sum_{\xi'''} | \xi''' \rangle \langle \xi''' | \beta | \xi'' \rangle = \\ &= \sum_{\xi'''} \langle \xi' | \alpha | \xi''' \rangle \langle \xi''' | \beta | \xi'' \rangle, \end{aligned} \quad (44)$$

т. е. требуемый результат. Из уравнения (44) видно, что матрица, построенная из элементов  $\langle \xi' | \alpha\beta | \xi'' \rangle$ , равна произведению матриц, построенных соответственно из элементов  $\langle \xi' | \alpha | \xi''' \rangle$  и  $\langle \xi''' | \beta | \xi'' \rangle$  согласно обычному математическому правилу перемножения матриц. По этому правилу элемент матрицы — произведения, расположенный в  $r$ -й строке и  $s$ -м столбце, равен сумме произведений каждого из элементов  $r$ -й строки первой матрицы на соответственный элемент  $s$ -го столбца второй матрицы. Умножение матриц некоммутативно, так же как и умножение линейных операторов.

Мы можем следующим образом подытожить наши результаты для случая, когда имеется только одна наблюдаемая  $\xi$ , и она имеет дискретный спектр собственных значений.

1. *Представителем любого линейного оператора является матрица*.

II. Представителем единичного оператора является единичная матрица.

III. Представителем вещественного оператора является эрмитова матрица.

IV. Представителями базисной наблюдаемой  $\xi$  или любой функции от  $\xi$  являются диагональные матрицы.

V. Матрица, являющаяся представителем произведения двух линейных операторов, равна произведению матриц, являющихся представителями обоих операторов-сомножителей.

Рассмотрим теперь случай, когда имеется только одна наблюдаемая  $\xi$ , но она имеет сплошной спектр собственных значений. Представителем оператора  $\alpha$  будет тогда  $\langle \xi' | \alpha | \xi'' \rangle$  — функция двух переменных  $\xi'$  и  $\xi''$ , каждая из которых может принимать непрерывный ряд значений. Удобно назвать такую функцию «матрицей», используя это слово в обобщенном смысле, для того чтобы иметь возможность использовать одну и ту же терминологию для случая дискретного и сплошного спектров \*). Такая обобщенная матрица, конечно, не может быть записана, подобно обычной матрице, в виде таблицы, так как число ее строк и столбцов бесконечно и равно числу точек, составляющих линию, а число элементов также бесконечно и равно числу точек на плоскости.

Расположим наши определения, относящиеся к этим матрицам, таким образом, чтобы правила (I)–(V), которые мы имели выше для случая дискретного спектра, годились также и в случае сплошного спектра собственных значений. Представителем единичного оператора является дельта-функция  $\delta(\xi' - \xi'')$ ; соответствующую обобщенную матрицу мы назовем *единичной матрицей*. Условием вещественности оператора  $\alpha$  будет по-прежнему уравнение (41), и мы будем называть обобщенную матрицу *эрмитовой*, если ее элементы  $\langle \xi' | \alpha | \xi'' \rangle$  удовлетворяют этому условию. Представители наблюдаемой  $\xi$  и функции  $f(\xi)$  имеют вид

$$\langle \xi' | \xi | \xi'' \rangle = \xi' \delta(\xi' - \xi''), \quad (45)$$

$$\langle \xi' | f(\xi) | \xi'' \rangle = f(\xi') \delta(\xi' - \xi''); \quad (46)$$

---

\*) В случае сплошного спектра более употребительно название «ядро оператора». (Прим. В. А. Фока.)

обобщенные матрицы с такими элементами мы будем называть *диагональными матрицами*. Согласно уравнению (11) в правых частях формул (45) и (46) можно с таким же правом написать соответственно  $\xi''$  и  $f(\xi'')$ . Используя формулу (24), получаем уравнение, аналогичное уравнению (44),

$$\langle \xi' | \alpha \beta | \xi'' \rangle = \int \langle \xi' | \alpha | \xi''' \rangle d\xi''' \langle \xi''' | \beta | \xi'' \rangle, \quad (47)$$

в котором сумма заменена интегралом. Обобщенную матрицу, образованную по этой формуле, мы будем называть произведением матриц  $\langle \xi' | \alpha | \xi''' \rangle$  и  $\langle \xi' | \beta | \xi'' \rangle$ . Благодаря этим определениям мы достигаем полного параллелизма между дискретным и сплошным спектром и правила (I)—(V) годятся в обоих случаях.

Возникает вопрос, какое определение следует дать диагональной матрице в случае сплошного спектра, поскольку до сих пор мы получали в формулах (45) и (46) лишь частные примеры диагональных матриц. Казалось бы, что диагональной матрицей следует считать такую, все элементы которой  $\langle \xi', \xi'' \rangle$  равны нулю, если только  $\xi'$  не отличается бесконечно мало от  $\xi''$ . Однако такое определение неудовлетворительно, так как важным свойством диагональных матриц в случае дискретного спектра является то, что все они коммутируют между собой, и это свойство должно выполняться также в случае сплошного спектра. Для того чтобы обобщенная матрица с элементами  $\langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle$  коммутировала с матрицей, определенной уравнением (45), должно выполняться равенство

$$\int \langle \xi' | \omega | \xi''' \rangle d\xi''' \xi''' \delta(\xi''' - \xi'') = \int \xi' \delta(\xi' - \xi''') d\xi''' \langle \xi''' | \omega | \xi'' \rangle,$$

которое следует из правила умножения (47). Если использовать формулу (4), то это условие запишется в виде

$$\langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle \xi'' = \xi' \langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle \quad (48)$$

или

$$(\xi' - \xi'') \langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle = 0.$$

Отсюда получаем

$$\langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle = c' \delta(\xi' - \xi'')$$

согласно правилу, по которому уравнение (13) следует из уравнения (12), причем  $c'$  есть число, которое может зависеть от  $\xi'$ . Таким образом, матричный элемент  $\langle \xi' | \omega | \xi'' \rangle$  имеет тот же вид, что и правая часть формулы (46). Поэтому мы будем называть диагональными только такие матрицы,

элементы которых имеют вид (46). Легко проверить, что все такие матрицы коммутируют друг с другом. Можно построить такие матрицы, у которых также обращаются в нуль все элементы ( $\xi', \xi''$ ), если  $\xi' \neq \xi''$ , но которые имеют другой вид особенности при  $\xi' = \xi''$ . (В дальнейшем мы введем производную  $\delta'(x)$  от дельта-функции, тогда матрица с элементами  $\delta'(\xi' - \xi'')$  будет примером подобного рода — см. § 22, уравнение (19).) Такие матрицы не являются диагональными согласно нашему определению.

Перейдем теперь к случаю, когда по-прежнему имеется только одна наблюдаемая  $\xi$ , но она имеет смешанный спектр собственных значений — как дискретный, так и сплошной. Обозначая через  $\xi^r, \xi^s$  дискретные, а через  $\xi', \xi''$  сплошные собственные значения, мы получаем, что представитель оператора  $\alpha$  состоит из величин четырех типов

$$\langle \xi^r | \alpha | \xi^s \rangle, \quad \langle \xi^r | \alpha | \xi' \rangle, \quad \langle \xi' | \alpha | \xi^r \rangle, \quad \langle \xi' | \alpha | \xi'' \rangle.$$

Все эти величины можно объединить и считать, что они образуют матрицу более общего вида, имеющую как дискретные строки и столбцы, так и непрерывные последовательности строк и столбцов. Понятия: единичная матрица, эрмитова матрица, диагональная матрица, а также произведение двух матриц определяются для этого более общего случая так, чтобы правила (I)—(V) по-прежнему выполнялись. Более подробно эти определения не стоит рассматривать, так как они являются непосредственным обобщением того, что было сделано ранее.

Вернемся теперь к общему случаю нескольких коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ . В этом случае можно также считать, что представитель оператора  $\alpha$ , т. е. совокупность чисел, выражаемых формулой (39), образует матрицу, в которой каждому набору значений  $\xi_1', \dots, \xi_n'$  соответствует строка, а каждому набору  $\xi_1'', \dots, \xi_n''$  — столбец. Если не все  $\xi$  имеют дискретный спектр собственных значений, то эта матрица будет обобщенной и будет иметь участки с непрерывными последовательностями строк и столбцов. Далее мы снова формулируем все определения так, чтобы правила (I)—(V) выполнялись, причем правило (IV) в этом случае обобщается и приобретает следующий вид.

IV'. Представителями каждой из наблюдаемых  $\xi_m$  ( $m = 1, 2, \dots, n$ ) и любой функции от них являются диагональные матрицы.

При этом по определению диагональной будет такая матрица, произвольный элемент которой  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \omega | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle$  имеет вид

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \omega | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle = c' \delta_{\xi'_1 \xi''_1} \dots \delta_{\xi'_v \xi''_v} \delta(\xi'_{v+1} - \xi''_{v+1}) \dots \delta(\xi'_u - \xi''_u), \quad (49)$$

если предполагать, что наблюдаемые  $\xi_1, \dots, \xi_v$  имеют дискретный, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  — сплошной спектр собственных значений. Здесь  $c'$  есть некоторая функция от всех  $\xi'$ . Это определение является обобщением того, которое мы имели для случая одной наблюдаемой  $\xi$ ; из него следует, что все диагональные матрицы коммутируют между собой.

Таким образом, представителями линейных операторов всегда являются матрицы. Представителем суммы двух линейных операторов будет сумма матриц, являющихся представителями слагаемых, а это, совместно с правилом (V), означает, что *матрицы подчиняются тем же самым алгебраическим соотношениям, что и линейные операторы*. Если выполняется какое-либо алгебраическое уравнение для линейных операторов, то это же уравнение должно выполняться и для матриц, являющихся представителями этих операторов.

Матричную схему можно расширить так, чтобы включить в нее представителей кет-векторов и бра-векторов. Представителями линейных операторов являются всегда квадратные матрицы — с одинаковым числом строк и столбцов и фактически с взаимно однозначным соответствием между строками и столбцами. Мы можем рассматривать представитель кет-вектора  $|P\rangle$  как *матрицу с одним столбцом*, расположив образующие представителя числа  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | P \rangle$  одно под другим. Номера строк в этой матрице должны быть те же, что и номера строк или столбцов в матрице — представителе линейного оператора. Такая одностолбцовая матрица может быть умножена слева на квадратную матрицу по правилу, аналогичному правилу умножения квадратных матриц. В результате мы получим другую одностолбцовую матрицу, элементы которой определяются формулой

$$\sum_{\xi''_1 \dots \xi''_v} \int \dots \int \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \alpha | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle d\xi''_{v+1} \dots d\xi''_u \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | P \rangle.$$

Согласно формуле (35) эти числа как раз равны числам  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \alpha | P \rangle$ , т. е. совокупность их является представителем кет-вектора  $\alpha | P \rangle$ . Аналогично представитель бра-вектора  $\langle Q |$  можно рассматривать как *матрицу с одной строкой*, расположив все числа  $\langle Q | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle$  одно за другим. Такую однострочную матрицу можно умножить справа на квадратную матрицу  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \alpha | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle$ , произведение будет снова однострочной матрицей, которая и является как раз представителем бра-вектора  $\langle Q | \alpha$ . Однострочную матрицу, являющуюся представителем бра-вектора, можно умножить справа на одностолбцовую матрицу — представитель кет-вектора  $| P \rangle$ ; произведение будет матрицей, содержащей только один элемент, который равен  $\langle Q | P \rangle$ . Наконец, однострочную матрицу — представитель бра-вектора  $\langle Q |$  можно умножить слева на одностолбцовую матрицу — представитель кет-вектора  $| P \rangle$ ; произведение будет квадратной матрицей, которая является как раз представителем оператора  $| P \rangle \langle Q |$ . Таким образом, все наши абстрактные символы — линейные операторы, бра-векторы и кет-векторы — могут быть представлены матрицами, причем эти матрицы будут удовлетворять тем же алгебраическим соотношениям, что и сами абстрактные символы.

## § 18. Амплитуды вероятности

Представления имеют большое значение для физического толкования квантовой механики, так как они дают удобный метод для получения вероятностей того, что наблюдаемые имеют заданные значения. В § 12 мы получили вероятность того, что для заданного состояния наблюдаемая имеет определенное значение, а в § 13 мы обобщили этот результат на случай, когда одновременно несколько наблюдаемых имеют определенные значения. Применим теперь этот результат к случаю, когда имеется полный набор коммутирующих наблюдаемых, пусть это будет набор наблюдаемых  $\xi$ , с которым мы уже имели дело. Согласно формуле (51) § 13 для состояния, которое характеризуется нормированным кет-вектором  $| x \rangle$ , вероятность того, что каждая из наблюдаемых  $\xi_r$  имеет значение  $\xi'_r$ , равна

$$P_{\xi'_1 \dots \xi'_u} = \langle x | \delta_{\xi_1 \xi'_1} \delta_{\xi_2 \xi'_2} \dots \delta_{\xi_u \xi'_u} | x \rangle. \quad (50)$$

Если все наблюдаемые  $\xi$  имеют дискретные собственные значения, то мы можем использовать формулу (35), отбросив в ней интеграл и положив  $v = u$ . Тогда получаем

$$\begin{aligned} P_{\xi'_1 \dots \xi'_u} &= \\ &= \sum_{\xi''_1 \dots \xi''_u} \langle x | \delta_{\xi'_1 \xi''_1} \delta_{\xi'_2 \xi''_2} \dots \delta_{\xi'_u \xi''_u} | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle \langle \xi''_1 \dots \xi''_u | x \rangle = \\ &= \sum_{\xi''_1 \dots \xi''_u} \langle x | \delta_{\xi'_1 \xi''_1} \delta_{\xi'_2 \xi''_2} \dots \delta_{\xi'_u \xi''_u} | \xi''_1 \dots \xi''_u \rangle \langle \xi''_1 \dots \xi''_u | x \rangle = \\ &= \langle x | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | x \rangle = |\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | x \rangle|^2 *). \end{aligned} \quad (51)$$

Мы получили, таким образом, простой результат: *вероятность того, что все наблюдаемые  $\xi$  имеют значения  $\xi'$ , в точности равна квадрату модуля соответствующей координаты нормированного кет-вектора, характеризующего рассматриваемое состояние.*

Если не все наблюдаемые имеют дискретный спектр собственных значений — скажем,  $\xi_1, \dots, \xi_v$  имеют дискретный, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  — непрерывный спектр, то физический смысл будет иметь лишь вероятность того, что каждая из наблюдаемых  $\xi_r$  ( $r = 1, \dots, v$ ) имеет определенное значение  $\xi'_r$ , а каждая из  $\xi_s$  ( $s = v + 1, \dots, u$ ) имеет значение, лежащее в малом промежутке от  $\xi'_s$  до  $\xi'_s + d\xi'_s$ . Для того чтобы получить эту вероятность, мы должны заменить каждый из множителей  $\delta_{\xi_s \xi'_s}$  в формуле (50) на множитель  $\chi_s$ , т. е. на такую функцию наблюдаемой  $\xi_s$ , которая равна единице, если  $\xi_s$  лежит в промежутке от  $\xi'_s$  до  $\xi'_s + d\xi'_s$  и равна нулю вне этого промежутка. Используя снова формулу (35), получаем для этой вероятности выражение

$$P_{\xi'_1 \dots \xi'_u} d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u = |\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | x \rangle|^2 d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u. \quad (52)$$

Таким образом, в любом случае *распределение вероятностей различных значений наблюдаемых  $\xi$  определяется квадратом модуля представителя нормированного кет-вектора, характеризующего данное состояние.*

Числа, совокупность которых образует представитель нормированного кет-вектора (или бра-вектора), можно поэтому назвать *амплитудами вероятности*. Квадрат мо-

\*) См. примечание на стр. 28, (Прим, перев.)

дуля амплитуды вероятности есть обычная вероятность или плотность вероятности на единицу интервала для тех переменных, которые имеют непрерывную область изменения.

Обратимся к случаю, когда состояние характеризуется ненормируемым кет-вектором  $|x\rangle$ . Это имеет место, например, если состояние является собственным состоянием некоторой наблюдаемой с собственным значением, лежащим в сплошном спектре. При этом можно по-прежнему использовать формулы (51) и (52), но они дают в этом случае относительную вероятность того, что наблюдаемые  $\xi$  имеют определенные значения, или что значения их лежат в некотором малом интервале. Таким образом, эти формулы дают тогда правильные величины для отношений вероятностей при различных  $\xi'$ . Числа  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_n | x \rangle$  можно поэтому назвать *относительными амплитудами вероятности*.

Представление, для которого справедливы полученные выше результаты, характеризуется тем, что его базисные векторы являются общими собственными векторами всех наблюдаемых  $\xi$ . Это представление можно характеризовать также требованием, чтобы каждая из наблюдаемых  $\xi$  имела своим представителем диагональную матрицу. Легко убедиться, что оба условия эквивалентны, однако второе из них является обычно более удобным. В дальнейшем мы будем формулировать его кратко, говоря, что все наблюдаемые  $\xi$  «диагональны в данном представлении».

Если предположить, что наблюдаемые  $\xi$  образуют *полный набор* коммутирующих наблюдаемых, то представление определяется каждым из этих условий полностью, с точностью до произвольного фазового множителя при каждом базисном векторе. Каждый базисный бра-вектор  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_n |$  можно умножить на  $e^{i\gamma'}$ ; где  $\gamma'$  — любая вещественная функция переменных  $\xi'_1, \dots, \xi'_n$ ; при этом не нарушится ни одно из условий, которым должно удовлетворять данное представление, т. е. условие, что все  $\xi$  диагональны или что все базисные векторы являются общими собственными векторами всех  $\xi$ . Не нарушатся также основные свойства базисных векторов (34) и (35). Если изменить базисные бра-векторы подобным образом, то представитель  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_n | P \rangle$  кет-вектора  $|P\rangle$  умножается при этом на  $e^{i\gamma'}$ , представитель  $\langle Q | \xi'_1 \dots \xi'_n \rangle$  бра-вектора  $\langle Q |$  — на  $e^{-i\gamma'}$ , а представитель  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_n | \alpha | \xi''_1 \dots \xi''_n \rangle$  линейного оператора умножается на  $e^{i(\gamma' - \gamma'')}$ . Ве-



роятности или относительные вероятности в формулах (51), (52), очевидно, при этом не изменятся.

Вероятности, которые вычисляются в конкретных задачах квантовой механики, почти всегда получаются как квадраты модулей амплитуд вероятности или относительных амплитуд вероятности. Даже если нас интересует вероятность тех или иных значений неполного набора коммутирующих наблюдаемых, то обычно оказывается необходимым сначала сделать этот набор полным путем добавления некоторого числа дополнительных коммутирующих наблюдаемых; затем получить вероятность определенных значений этого полного ряда наблюдаемых (в виде квадрата модуля соответствующей амплитуды вероятности) и, наконец, просуммировать или проинтегрировать по всем возможным значениям дополнительных наблюдаемых. Более прямой способ расчета вероятностей с помощью формулы (51) в большинстве случаев практически неудобен.

Итак, для того чтобы построить представление, делаем следующее.

I. Ищем те наблюдаемые, которые желательно сделать диагональными, либо потому что нас интересуют вероятности для этих наблюдаемых, либо в целях математической простоты.

II. Мы должны проверить, что все они коммутируют — это является необходимым условием, так как диагональные матрицы коммутируют всегда.

III. Затем мы проверяем, образуют ли они полный набор коммутирующих наблюдаемых, а если нет, то добавляем еще столько коммутирующих наблюдаемых, чтобы набор всех наблюдаемых стал полным.

IV. Строим ортогональное представление, в котором все наблюдаемые из полного коммутирующего набора диагональны.

Таким путем представление определяется полностью с точностью до произвольных фазовых множителей. Для большинства задач эти фазовые множители несущественны и тривиальны, и мы можем считать, что представление полностью определено, если заданы наблюдаемые, которые в этом представлении диагональны. Этот факт уже отражен в наших обозначениях, так как в выражении для представителя само представление характеризуется только буквами, обозначающими те наблюдаемые, которые диагональны.

Может случиться, что нас будут интересовать два представления для одной и той же динамической системы. Предположим, что в одном из этих представлений диагональны коммутирующие наблюдаемые  $\xi_1, \dots, \xi_u$ , образующие полный набор, и базисные бра-векторы будут  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u |$ ; а в другом представлении диагональны наблюдаемые  $\eta_1, \dots, \eta_w$  и базисные бра-векторы будут  $\langle \eta'_1 \dots \eta'_w |$ . Кет  $|P\rangle$  будет тогда иметь двух представителей  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | P \rangle$  и  $\langle \eta'_1 \dots \eta'_w | P \rangle$ . Если наблюдаемые  $\xi_1, \dots, \xi_v$  и  $\eta_1, \dots, \eta_x$  имеют дискретный спектр собственных значений, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  и  $\eta_{x+1}, \dots, \eta_w$  — непрерывный спектр, то из формулы (35) мы получаем

$$\langle \eta'_1 \dots \eta'_w | P \rangle = \sum_{\xi'_1 \dots \xi'_v} \int \dots \int \langle \eta'_1 \dots \eta'_w | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle \times \\ \times d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | P \rangle, \quad (53)$$

а также, меняя местами  $\xi$  и  $\eta$ ,

$$\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | P \rangle = \sum_{\eta'_1 \dots \eta'_x} \int \dots \int \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_w \rangle \times \\ \times d\eta'_{x+1} \dots d\eta'_w \langle \eta'_1 \dots \eta'_w | P \rangle. \quad (54)$$

Эти уравнения преобразования выражают один представитель кет-вектора  $|P\rangle$  через другой. Из них следует, что любой из представителей может быть линейно выражен через другой, причем коэффициентами разложения будут величины

$$\langle \eta'_1 \dots \eta'_w | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle, \quad \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_w \rangle. \quad (55)$$

Эти величины называются *функциями преобразования*. Такие же уравнения можно написать для того, чтобы связать два представителя бра-вектора или оператора. Функции преобразования (55) являются средством, позволяющим в любом случае переходить от одного представления к другому. Обе функции являются комплексно-сопряженными друг другу, и, кроме того, удовлетворяют условию

$$\sum_{\xi'_1 \dots \xi'_v} \int \dots \int \langle \eta'_1 \dots \eta'_w | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u \times \\ \times \langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_w \rangle = \\ = \delta_{\eta'_1 \eta'_1} \dots \delta_{\eta'_x \eta'_x} \delta(\eta'_{x+1} - \eta'_{x+1}) \dots \delta(\eta'_w - \eta'_w) \quad (56)$$

и аналогичному условию, в котором  $\xi$  и  $\eta$  следует поменять местами. Эти равенства можно доказать, используя уравнения (35) и (34) и соответствующие уравнения для  $\eta$ .

Функции преобразования являются примером амплитуд вероятности или же амплитуд относительной вероятности. Рассмотрим случай, когда все  $\xi$  и все  $\eta$  имеют дискретный спектр собственных значений. Тогда базисные векторы  $|\eta'_1 \dots \eta'_\omega\rangle$  нормированы, так что их представители в  $\xi$ -представлении, т. е.  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_u \dots | \eta'_1 \dots \eta'_\omega \rangle$ , являются амплитудами вероятности того, что наблюдаемые  $\xi$  имеют значения  $\xi'$ . Состояние, к которому относятся эти вероятности, а именно состояние, которое характеризуется вектором  $|\eta'_1 \dots \eta'_\omega\rangle$ , определяется тем условием, что одновременное измерение наблюдаемых  $\eta_1, \dots, \eta_\omega$  наверняка приводит к результату  $\eta'_1, \dots, \eta'_\omega$ . Таким образом, число  $|\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_\omega \rangle|^2$  есть вероятность того, что все наблюдаемые  $\xi$  имеют значения  $\xi'_1 \dots \xi'_u$  для состояния, в котором все  $\eta$  наверняка имеют значения  $\eta'_1 \dots \eta'_\omega$ . Из тождества

$$|\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_\omega \rangle|^2 = |\langle \eta'_1 \dots \eta'_\omega | \xi'_1 \dots \xi'_u \rangle|^2$$

следует теорема взаимности: *вероятность того, что все  $\xi$  имеют значения  $\xi'$  в состоянии, для которого все  $\eta$  наверняка имеют значения  $\eta'$ , равна вероятности того, что все  $\eta$  имеют значения  $\eta'$  в состоянии, для которого все  $\xi$  наверняка имеют значения  $\xi'$ .*

Если все наблюдаемые  $\eta$  имеют дискретный спектр собственных значений, а некоторые из  $\xi$  имеют сплошной спектр, то величина  $|\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_\omega \rangle|^2$  по-прежнему дает вероятность или плотность вероятности различных значений  $\xi$  для состояния, в котором все  $\eta$  имеют наверняка значения  $\eta'$ . Если же и некоторые из  $\eta$  имеют сплошной спектр собственных значений, то векторы  $|\eta'_1 \dots \eta'_\omega\rangle$  не нормированы и величина  $|\langle \xi'_1 \dots \xi'_u | \eta'_1 \dots \eta'_\omega \rangle|^2$  дает только относительную вероятность или плотность вероятности значений  $\xi$  для состояния, в котором все  $\eta$  наверняка имеют значения  $\eta'$ .

## § 19. Теоремы о функциях наблюдаемых

Мы проиллюстрируем математическое значение представлений, используя их для доказательства некоторых теорем.

**Теорема 1.** *Линейный оператор, который коммутирует с наблюдаемой  $\xi$ , коммутирует также с любой функцией  $\xi$ .*

Теорема очевидно, верна, если функция разложима в степенной ряд. Докажем ее в общем случае. Пусть  $\omega$  — линейный оператор, удовлетворяющий уравнению

$$\xi\omega - \omega\xi = 0. \quad (57)$$

Введем представление, в котором наблюдаемая  $\xi$  диагональна. Если  $\xi$  сама по себе не образует полной совокупности коммутирующих наблюдаемых, то мы должны сделать эту совокупность полной путем добавления некоторого числа наблюдаемых  $\beta$ , а затем построить представление, в котором диагональны как  $\xi$ , так и  $\beta$ . (Случай, когда наблюдаемая  $\xi$  сама образует полную совокупность, можно рассматривать как частный случай, когда число наблюдаемых  $\beta$  равно нулю.) В этом представлении уравнение (57) примет вид

$$\langle \xi' \beta' | \xi \omega - \omega \xi | \xi'' \beta'' \rangle = 0,$$

откуда получаем

$$\xi' \langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle - \langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle \xi'' = 0.$$

В случае, когда спектр собственных значений  $\xi$  дискретен, из этого уравнения следует, что все матричные элементы  $\langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle$  оператора  $\omega$  равны нулю, кроме тех, для которых  $\xi' = \xi''$ . В случае, когда  $\xi$  имеет сплошной спектр собственных значений, можно, так же как для уравнения (48), показать, что  $\langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle$  имеет вид

$$\langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle = c \delta(\xi' - \xi''),$$

где  $c$  есть некоторая функция от  $\xi'$ , а также от  $\beta'$  и  $\beta''$ . В обоих случаях мы можем говорить, что матрица — представитель оператора  $\omega$  диагональна по отношению к  $\xi$ . Если наблюдаемая  $f(\xi)$  есть некоторая функция от  $\xi$ , то, в соответствии с общей теорией в § 11, согласно которой функция  $f(\xi'')$  должна быть определена для всех собственных значений  $\xi''$  наблюдаемой  $\xi$ , мы можем в обоих случаях получить

$$f(\xi') \langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle - \langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle f(\xi'') = 0.$$

Отсюда следует

$$\langle \xi' \beta' | f(\xi) \omega - \omega f(\xi) | \xi'' \beta'' \rangle = 0,$$

так что

$$f(\xi)\omega - \omega f(\xi) = 0,$$

и, следовательно, теорема доказана.

В качестве частного случая этой теоремы получаем, что любая наблюдаемая, коммутирующая с наблюдаемой  $\xi$ , коммутирует также с произвольной функцией от  $\xi$ . Этот результат является, очевидно, необходимым с физической точки зрения, если отождествлять, как мы это сделали в § 13, условие коммутативности двух наблюдаемых и условие совместности соответствующих измерений. Любое измерение, совместное с измерением наблюдаемой  $\xi$ , должно быть совместно также и с измерением  $f(\xi)$ , так как любое измерение  $\xi$  включает в себя и измерение  $f(\xi)$ .

**Теорема 2.** *Линейный оператор, который коммутирует со всеми коммутирующими между собой наблюдаемыми из полного набора, является функцией этих наблюдаемых.*

Пусть  $\omega$  — линейный оператор, а  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$  — полный набор коммутирующих наблюдаемых. Введем представление, в котором эти наблюдаемые диагональны. Так как  $\omega$  коммутирует с каждой из наблюдаемых  $\xi$ , то матрица, являющаяся представителем  $\omega$ , диагональна по отношению к каждой из наблюдаемых  $\xi$  по причинам, которые были рассмотрены выше. Отсюда следует, что эта матрица будет диагональной и будет иметь вид (49), причем число  $c'$  является функцией переменных  $\xi'$ . Таким образом, матрица является представителем функции  $c'$  от  $\xi'$  и, следовательно,  $\omega$  является той же функцией от наблюдаемых  $\xi$ .

**Теорема 3.** *Если наблюдаемая  $\xi$  и линейный оператор  $g$  таковы, что каждый линейный оператор, который коммутирует с  $\xi$ , коммутирует также и с  $g$ , то  $g$  является функцией от  $\xi$ .*

Эта теорема является обратной теореме 1. Для доказательства используем то же самое представление, в котором наблюдаемая  $\xi$  диагональна и которое мы уже использовали в теореме 1. Во-первых, мы видим, что оператор  $g$  должен коммутировать с самой наблюдаемой  $\xi$ ; отсюда следует, что представитель  $g$  должен быть диагонален относительно  $\xi$ , т. е. он должен иметь вид

$$\langle \xi' \beta' | g | \xi'' \beta'' \rangle = a(\xi' \beta' \beta'') \delta_{\xi' \xi''} \quad \text{или} \quad a(\xi' \beta' \beta'') \delta(\xi' - \xi'')$$

в зависимости от того, имеет ли  $\xi$  дискретный или сплошной спектр собственных значений. Далее, пусть  $\omega$  — линейный

оператор, который коммутирует с  $\xi$ , так что его представитель имеет вид

$$\langle \xi' \beta' | \omega | \xi'' \beta'' \rangle = b(\xi' \beta' \beta'') \delta_{\xi' \xi''} \quad \text{или} \quad b(\xi' \beta' \beta'') \delta(\xi' - \xi'').$$

Согласно гипотезе оператор  $\omega$  должен коммутировать также и с  $g$ , так что выполняется уравнение

$$\langle \xi' \beta' | g\omega - \omega g | \xi'' \beta'' \rangle = 0. \quad (58)$$

Если для определенности предположить, что все наблюдаемые  $\beta$  имеют дискретный спектр собственных значений, то из уравнения (58), используя правило умножения матриц, получаем

$$\sum_{\beta'''} \{a(\xi' \beta' \beta''') b(\xi' \beta'' \beta'') - b(\xi' \beta' \beta''') a(\xi' \beta'' \beta'')\} = 0, \quad (59)$$

причем левая часть уравнения (59) отличается от левой части уравнения (58) множителем  $\delta_{\xi' \xi''}$  или  $\delta(\xi' - \xi'')$ . Уравнение (59) должно выполняться для всех функций  $b(\xi' \beta' \beta'')$ . Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} a(\xi' \beta' \beta'') &= 0 \quad \text{при} \quad \beta' \neq \beta'', \\ a(\xi' \beta' \beta') &= a(\xi' \beta'' \beta''). \end{aligned}$$

Первое из этих уравнений означает, что матрица — представитель оператора  $g$  диагональна, а второе — что функция  $a(\xi' \beta' \beta')$  не зависит от  $\beta'$ . Отсюда мы можем заключить, что оператор является такой же функцией от  $\xi$ , какой является  $a(\xi' \beta' \beta')$  от  $\xi'$ , и, таким образом, теорема доказана. Если все наблюдаемые  $\beta$  или некоторые из них имеют сплошной спектр собственных значений, то доказательство аналогично.

Теоремы 1 и 3 выполняются также, если заменить наблюдаемую  $\xi$  набором коммутирующих наблюдаемых  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_r$ . Изменения в ходе доказательства будут при этом чисто формальными.

## § 20. Усовершенствование обозначений

Теория представлений, развитая нами, позволяет ввести общую систему для обозначения значками бра- и кет-векторов. В представлении, в котором диагональны коммутирующие наблюдаемые  $\xi_1, \dots, \xi_n$ , составляющие полный

набор, представитель произвольного кет-вектора  $|P\rangle$  будет иметь вид  $\langle \xi'_1 \dots \xi'_n | P \rangle$  или, для краткости  $\langle \xi' | P \rangle$ . Этот представитель является некоторой определенной функцией переменных  $\xi'$ ; обозначим ее  $\psi(\xi')$ . Тогда функция  $\psi$  однозначно определяет кет  $|P\rangle$ , и она может быть поэтому использована для обозначения значками этого кет-вектора вместо произвольного значка  $P$ . Таким образом, если

$$\left. \begin{aligned} \langle \xi' | P \rangle &= \psi(\xi'), \\ |P\rangle &= |\psi(\xi')\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (60)$$

Мы должны писать  $|\psi(\xi')\rangle$ , а не  $|\psi(\xi)\rangle$  потому, что этот вектор зависит не от частных значений чисел  $\xi'$ , а только от вида функции  $\psi$ .

Если  $f(\xi)$  — произвольная функция наблюдаемых  $\xi_1, \dots, \xi_n$ , то представитель вектора  $f(\xi) |P\rangle$  будет иметь вид

$$\langle \xi' | f(\xi) | P \rangle = f(\xi') \psi(\xi').$$

В соответствии с формулами (60) обозначаем

$$f(\xi) |P\rangle = |f(\xi) \psi(\xi')\rangle.$$

Наконец, используя второе из уравнений (60), получаем

$$f(\xi) |\psi(\xi')\rangle = |f(\xi) \psi(\xi')\rangle. \quad (61)$$

Этот результат является общим и справедлив для любых функций  $\psi$  и  $f$  наблюдаемых  $\xi$ ; мы видим, таким образом, что вертикальная черта  $|$  не является обязательной для нового обозначения кет-вектора; обе стороны уравнения (61) можно записать просто в виде  $f(\xi) \psi(\xi')$ . Тогда правило, по которому вводятся новые обозначения, примет вид: если

$$\left. \begin{aligned} \langle \xi' | P \rangle &= \psi(\xi'), \\ |P\rangle &= \psi(\xi'). \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

Далее мы будем писать кратко  $\psi\rangle$  вместо  $|\psi(\xi')\rangle$ , опуская переменную  $\xi$ , которая будет подразумеваться в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений.

Кет  $\psi\rangle$  можно рассматривать как произведение линейного оператора  $\psi(\xi)$  на кет, который мы будем обозначать просто символом  $\rangle$  без всяких дополнительных значков. Назовем кет  $\rangle$  *стандартным кет-вектором*. Любой кет может быть представлен как произведение функции

наблюдаемых  $\xi$  на стандартный кет. Например, взяв вместо  $|P\rangle$  в формуле (62) базисный вектор  $|\xi''\rangle$ , находим

$$|\xi''\rangle = \delta_{\xi_1 \xi_1''} \dots \delta_{\xi_v \xi_v''} \delta(\xi_{v+1} - \xi_{v+1}'') \dots \delta(\xi_u - \xi_u''), \quad (63)$$

для случая, когда наблюдаемые  $\xi_1, \dots, \xi_v$  имеют дискретный, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  — сплошной спектры собственных значений. Стандартный кет обладает тем основным свойством, что его представитель  $\langle \xi' |$  равен единице при всех значениях переменной  $\xi'$ , как легко видеть, полагая в формуле (62),  $\psi = 1$ .

Дальнейшее сокращение обозначений можно сделать, если опускать символ  $\rangle$ , подразумевая стандартный вектор. Тогда кет запишется просто в виде  $\psi(\xi)$  — в виде функции наблюдаемых  $\xi$ . Функция наблюдаемых  $\xi$ , используемая таким образом для обозначения кет-вектора состояния, называется *волновой функцией* \*). Система обозначений, основанная на волновых функциях, используется обычно большинством авторов в квантовых расчетах. При пользовании этими обозначениями следует подразумевать, что каждая волновая функция умножена справа на стандартный кет-вектор, и это предохраняет нас от умножения волновой функции на оператор справа. *Волновые функции можно умножать на операторы только слева*. Это отличает их от обычных функций наблюдаемых  $\xi$ , которые являются операторами и могут умножаться на другие операторы как справа, так и слева. Волновая функция, как функция наблюдаемых  $\xi$ , и представитель, как функция собственных значений  $\xi'$ , — обе эти функции имеют одинаковый вид для одного и того же вектора состояния. Квадрат модуля волновой функции дает вероятность (или относительную вероятность, если функция не нормирована) того, что для данного состояния наблюдаемые  $\xi$  имеют определенные значения или лежат в определенных малых промежутках.

Новые обозначения для бра-векторов можно ввести тем же путем. Бра  $\langle Q |$ , представителем которого  $\langle Q | \xi' \rangle$  является функция  $\varphi(\xi')$ , мы будем записывать в виде  $\langle \varphi(\xi) |$ . В этих обозначениях бра-вектором, сопряженным кет-век-

---

\*) Название было дано потому, что на заре квантовой механики все примеры этих функций имели вид волн. С точки зрения современной общей теории такое название не отражает характерных свойств этих функций.



тору  $|\psi(\xi)\rangle$ , будет  $\langle\bar{\psi}(\xi)|$ . Таким образом, правило, согласно которому два сопряженных вектора снабжаются одинаковыми значками, следует несколько уточнить и сформулировать следующим образом. *Если значки, от которых зависит кет-вектор, содержат комплексные числа или комплексные функции, то значками для сопряженного бра-вектора будут комплексно-сопряженные числа или функции.* Так же, как и в случае кет-векторов, можно показать, что  $\langle\varphi(\xi)|f(\xi)$  и  $\langle\varphi(\xi)|f(\xi)\rangle$  — одинаковые бра-векторы, так что вертикальная черта может быть опущена. Мы можем рассматривать бра  $\langle\varphi(\xi)$  как произведение линейного оператора  $\varphi$  ( $\xi$ ) и стандартного бра  $\langle$ , который является вектором, сопряженным стандартному вектору  $\rangle$ . Мы можем опускать символ  $\langle$ , подразумевая его, тогда произвольный бра-вектор запишется в виде  $\varphi(\xi)$  — в виде комплексно-сопряженной волновой функции. Комплексно-сопряженную волновую функцию можно умножать на оператор только справа, но не слева. Можно построить тройное произведение  $\langle f(\xi)\rangle$ . Такое произведение является числом, равным функции  $f(\xi)$ , просуммированной или проинтегрированной по всему спектру собственных значений наблюдаемых  $\xi$ , т. е.

$$\langle f(\xi)\rangle = \sum_{\xi'_1 \dots \xi'_v} \int \dots \int f(\xi') d\xi'_{v+1} \dots d\xi'_u \quad (64)$$

для случая, когда  $\xi_1, \dots, \xi_v$  имеют дискретный, а  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_u$  — сплошной спектры собственных значений.

Стандартные кет и бра определены для данного представления. Если провести те же рассуждения для другого представления, в котором диагональны другие коммутирующие наблюдаемые  $\eta$ , образующие полный набор, или если мы даже просто изменим фазовые множители в старом представлении, в котором диагональны наблюдаемые  $\xi$ , то мы получим другие стандартные кет и бра. В тех рассуждениях, в которых появляется несколько стандартных кет-векторов и бра-векторов, следует, конечно, различать их, снабжая их значками.

Теперь рассмотрим дальнейшее усовершенствование обозначений, которое является весьма важным для изучения сложных динамических систем. Пусть имеется динамическая система, которая описывается такими динамическими переменными, что все они могут быть разбиты на две группы —

$A$  и  $B$ , причем любая переменная из группы  $A$  коммутирует с переменной из группы  $B$ . Произвольная динамическая переменная должна быть представима в виде функции переменных  $A$  и переменных  $B$ . Можно рассмотреть другую динамическую систему, в которой динамическими переменными являются только переменные  $A$ , назовем ее системой  $A$ . Точно так же можно рассмотреть третью систему, в которой динамическими переменными являются только переменные  $B$  — систему  $B$ . Исходную систему можно рассматривать как комбинацию системы  $A$  и системы  $B$  в соответствии с математической схемой, приведенной ниже.

Рассмотрим кет-векторы  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ , характеризующие соответственно состояния систем  $A$  и  $B$ . Предположим, что имеет смысл произведение  $|a\rangle|b\rangle$ , для которого выполняются перестановочная и распределительная аксиомы, т. е.

$$\begin{aligned}|a\rangle|b\rangle &= |b\rangle|a\rangle, \\ \{c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle\}|b\rangle &= c_1|a_1\rangle|b\rangle + c_2|a_2\rangle|b\rangle, \\ |a\rangle\{c_1|b_1\rangle + c_2|b_2\rangle\} &= c_1|a\rangle|b_1\rangle + c_2|a\rangle|b_2\rangle,\end{aligned}$$

где  $c$  — комплексные числа. Мы можем придать смысл действию на это произведение любой из переменных  $A$ , считая, что она действует только на множитель  $|a\rangle$  и коммутирует с множителем  $|b\rangle$ . Точно так же можно придать смысл действию на это произведение любой из переменных  $B$ , считая, что она действует только на множитель  $|b\rangle$  и коммутирует с множителем  $|a\rangle$ . (Отсюда вытекает, что каждая переменная  $A$  коммутирует с каждой переменной  $B$ .) Таким образом, любая динамическая переменная исходной системы может действовать на произведение  $|a\rangle|b\rangle$  так, что его можно рассматривать как кет этой системы и записывать в виде  $|ab\rangle$ , причем двух значков  $a$  и  $b$  достаточно для его обозначения. Таким образом, мы получаем основное уравнение

$$|a\rangle|b\rangle = |b\rangle|a\rangle = |ab\rangle. \quad (65)$$

Умножение в этой формуле имеет совершенно другую природу, чем умножение, которое рассматривалось ранее в излагаемой теории. Кет-векторы  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  находятся в двух различных векторных пространствах, а их произведение находится в третьем векторном пространстве, которое можно считать произведением первых двух пространств.

Число измерений в произведении двух пространств равно произведению числа измерений каждого из пространств-сомножителей. Произвольный кет-вектор в произведении пространств не обязательно имеет вид (65), а является, вообще говоря, суммой или интегралом кет-векторов такого вида.

Рассмотрим такое представление для системы  $A$ , в котором коммутирующие наблюдаемые  $\xi_A$ , составляющие полный набор для этой системы, диагональны. Тогда базисными бра-векторами для системы  $A$  будут бра-векторы  $\langle \xi'_A |$ . Аналогично, рассматривая представление для системы  $B$ , в котором диагональны наблюдаемые  $\xi_B$ , мы получаем базисные бра-векторы  $\langle \xi'_B |$  для системы  $B$ . Произведения

$$\langle \xi'_A | \langle \xi'_B | = \langle \xi'_A \xi'_B | \quad (66)$$

являются базисными бра-векторами представления для исходной системы; в этом представлении будут диагональны наблюдаемые  $\xi_A$  и  $\xi_B$ . Переменные  $\xi_A$  и  $\xi_B$  вместе образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых исходной системы. Из формул (65) и (66) получаем

$$\langle \xi'_A | a \rangle \langle \xi'_B | b \rangle = \langle \xi'_A \xi'_B | ab \rangle, \quad (67)$$

откуда видно, что представитель произведения  $|ab\rangle$  равен произведению представителей векторов  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  в соответствующих представлениях.

Можно ввести стандартный кет  $|A\rangle$  для системы  $A$  и для данного представления, в котором наблюдаемые  $\xi_A$  диагональны, а также стандартный кет  $|B\rangle$  для системы  $B$  и для представления, в котором диагональны  $\xi_B$ . Их произведение  $|A\rangle_B$  будет тогда стандартным кет-вектором для исходной системы и для того представления, в котором диагональны наблюдаемые  $\xi_A$  и  $\xi_B$ . Любой кет исходной системы может быть представлен в виде

$$\psi(\xi_A \xi_B) |A\rangle_B. \quad (68)$$

Может случиться, что в тех или иных вычислениях мы хотим использовать определенное представление для системы  $B$ , например уже рассмотренное представление, в котором диагональны наблюдаемые  $\xi_B$ , но не хотим вводить определенное представление для системы  $A$ . Тогда удобно использовать стандартный кет  $|B\rangle$  для системы  $B$ , но не вводить стандартного кет-вектора для системы  $A$ . В таком

случае произвольный кет исходной системы можно записать в виде

$$|\xi_B\rangle\rangle_B, \quad (69)$$

где  $|\xi_B\rangle$  есть кет для системы  $A$ , зависящий от наблюдаемых  $\xi_B$  как от параметров, т. е., вообще говоря, различный для различных наборов значений наблюдаемых  $\xi_B$ . Выражения (68) и (69) будут равны между собой, если положить

$$|\xi_B\rangle = \psi(\xi_A \xi_B) \rangle_A.$$

Можно опускать стандартный вектор  $\rangle_B$  в выражении (69), подразумевая его; тогда произвольный кет для исходной системы будет иметь вид  $|\xi_B\rangle$  и будет являться кет-вектором состояния для системы  $A$  и волновой функцией, зависящей от переменных  $\xi_B$ , системы  $B$ . Подобные обозначения будут использованы в §§ 66 и 79.

Все эти рассуждения можно немедленно обобщить на динамическую систему, которая описывается такими динамическими переменными, что они могут быть разбиты на три или более групп:  $A, B, C, \dots$ , так что каждый член из одной группы коммутирует с любым членом другой группы. Уравнение (65) тогда обобщается и принимает вид

$$|a\rangle|b\rangle|c\rangle\dots = |abc\dots\rangle,$$

где множители в левой части являются кет-векторами подсистем, а кет в правой части характеризует исходную систему. Уравнения (66)–(68) обобщаются на случай нескольких сомножителей тем же путем.

## ГЛАВА IV

### КВАНТОВЫЕ УСЛОВИЯ

#### § 21. Скобки Пуассона

До сих пор мы занимались построением общей математической схемы квантовой механики, описывающей состояния и наблюдаемые. Одно из основных свойств этой схемы заключается в том, что наблюдаемым или динамическим переменным сопоставляются такие величины, которые не подчиняются коммутативному закону умножения. Теперь нам необходимо получить уравнения, которые заменили бы коммутативный закон умножения и которые позволили бы определить, чему равна разность  $\xi\eta - \eta\xi$ , если  $\xi$  и  $\eta$  — какая-то пара наблюдаемых или динамических переменных. Только тогда, когда эти уравнения будут установлены, мы будем иметь законченную схему новой механики, которая должна заменить механику классическую. Эти новые уравнения называются *квантовыми условиями* или *перестановочными соотношениями*.

Проблема отыскания квантовых условий не имеет столь общего характера как все то, что мы рассматривали до сих пор. Это, напротив, частная задача, которая возникает для каждой частной системы, изучаемой нами. Однако существует довольно общий метод получения квантовых условий, применимый к очень широкому классу динамических систем. Это метод *классической аналогии*; он и является главной темой этой главы. Те динамические системы, к которым этот метод неприменим, следует рассматривать по отдельности и пользоваться в каждом случае особыми соображениями.

Значение классической аналогии в построении квантовой механики связано с тем фактом, что классическая механика правильно описывает динамические системы в определенных условиях — когда частицы и тела, образующие систему, достаточно массивны, так что возмущение, сопровождающее

наблюдение, пренебрежимо мало. Поэтому классическая механика должна быть предельным случаем квантовой. Таким образом, мы должны ожидать, что важные понятия классической механики будут соответствовать важным понятиям квантовой механики. Учитывая общий характер аналогии между классической и квантовой механикой, мы можем надеяться получить законы и теоремы квантовой механики, являющиеся простыми обобщениями хорошо известных результатов классической механики. В частности, можно надеяться получить квантовые условия, являющиеся простым обобщением классического закона, согласно которому все динамические переменные коммутируют.

Рассмотрим динамическую систему, состоящую из взаимодействующих частиц. В качестве независимых динамических переменных, характеризующих эту систему, можно воспользоваться декартовыми координатами всех частиц и соответствующими компонентами скоростей частиц. Более удобно, однако, использовать вместо компонент скорости компоненты импульса. Обозначим координаты через  $q_r$ , а соответствующие компоненты импульса через  $p_r$ , причем значок  $r$  принимает значения от 1 до  $3n$ , где  $n$  — число частиц. Величины  $q$  и  $p$  называются *каноническими координатами и импульсами*.

В методе уравнений движения Лагранжа координаты  $q_r$  и импульсы  $p_r$  вводятся более общим способом, который применим также к системам, состоящим не только из частиц (например, к системам, состоящим из твердых тел). Эти более общие величины  $q$  и  $p$  также называются *каноническими координатами и импульсами*. Любая динамическая переменная может быть выражена как функция набора канонических координат и импульсов.

Важным понятием в классической динамике являются *скобки Пуассона*. Любой паре динамических переменных  $u$  и  $v$  можно сопоставить СП (скобку Пуассона), которую мы будем обозначать символом  $[u, v]$  и которая определяется формулой

$$[u, v] = \sum_r \left\{ \frac{\partial u}{\partial q_r} \frac{\partial v}{\partial p_r} - \frac{\partial u}{\partial p_r} \frac{\partial v}{\partial q_r} \right\}, \quad (1)$$

причем  $u$  и  $v$  рассматриваются при дифференцировании как функции некоторого набора канонических координат и импульсов. Правая часть уравнения (1) не зависит от того,

какой именно набор канонических координат и импульсов взят при вычислении (1); это следует из общего определения канонических переменных. Таким образом, определение СП является однозначным. Главные свойства СП, которые непосредственно следуют из определения (1), таковы:

$$[u, v] = -[v, u], \quad (2)$$

$$[u, c] = 0, \quad (3)$$

где  $c$  является числом (которое можно рассматривать как частный случай динамической переменной),

$$\left. \begin{aligned} [u_1 + u_2, v] &= [u_1, v] + [u_2, v], \\ [u, v_1 + v_2] &= [u, v_1] + [u, v_2], \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\left. \begin{aligned} [u_1 u_2, v] &= \sum_r \left\{ \left( \frac{\partial u_1}{\partial q_r} u_2 + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial q_r} \right) \frac{\partial v}{\partial p_r} - \right. \\ &\quad \left. - \left( \frac{\partial u_1}{\partial p_r} u_2 + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial p_r} \right) \frac{\partial v}{\partial q_r} \right\} = [u_1, v] u_2 + u_1 [u_2, v], \\ [u_1, v_1 v_2] &= [u, v_1] v_2 + v_1 [u, v_2]. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Легко также проверить, что выполняется тождество

$$[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0. \quad (6)$$

Уравнения (4) означают, что СП  $[u, v]$  содержит  $u$  и  $v$  линейно, в то время как уравнения (5) соответствуют обычному правилу дифференцирования произведения.

Попытаемся ввести квантовую СП, которая была бы аналогом классической. Мы предположим, что квантовая СП удовлетворяет всем условиям (2)–(6), причем теперь необходимо, чтобы порядок сомножителей  $u_1, v_1$  и  $u_2, v_2$  во всех частях уравнений (5) оставался таким, как мы его здесь написали. Из нижеследующего рассуждения видно, что этих условий уже достаточно, чтобы определить однозначно явный вид квантовых СП. Можно вычислить СП  $[u_1 u_2, v_1 v_2]$  двумя разными способами, используя либо первое, либо второе из уравнений (5). Получаем

$$\begin{aligned} [u_1 u_2, v_1 v_2] &= [u_1, v_1 v_2] u_2 + u_1 [u_2, v_1 v_2] = \\ &= \{[u_1, v_1] v_2 + v_1 [u_1, v_2]\} u_2 + u_1 \{[u_2, v_1] v_2 + v_1 [u_2, v_2]\} = \\ &= [u_1, v_1] v_2 u_2 + v_1 [u_1, v_2] u_2 + u_1 [u_2, v_1] v_2 + u_1 v_1 [u_2, v_2], \end{aligned}$$

и, с другой стороны,

$$\begin{aligned}[u_1 u_2, v_1 v_2] &= [u_1 u_2, v_1] v_2 + v_1 [u_1 u_2, v_2] = \\ &= [u_1, v_1] u_2 v_2 + u_1 [u_2, v_1] v_2 + v_1 [u_1, v_2] u_2 + v_1 u_1 [u_2, v_2].\end{aligned}$$

Приравнивая оба результата, имеем

$$[u_1, v_1] (u_2 v_2 - v_2 u_2) = (u_1 v_1 - v_1 u_1) [u_2, v_2].$$

Поскольку это условие выполняется для операторов  $u_1$  и  $v_1$ , которые никак не связаны с операторами  $u_2$  и  $v_2$ , то мы должны иметь

$$\begin{aligned}u_1 v_1 - v_1 u_1 &= i\hbar [u_1, v_1], \\ u_2 v_2 - v_2 u_2 &= i\hbar [u_2, v_2],\end{aligned}$$

где величина  $\hbar$  не должна зависеть ни от  $u_1$  и  $v_1$ , ни от  $u_2$  и  $v_2$ , а, кроме того, должна коммутировать с  $(u_1 v_1 - v_1 u_1)$ . Отсюда следует, что величина  $\hbar$  должна быть просто числом. Мы хотим, чтобы СП от двух вещественных переменных была также вещественной, так же как и в классической теории. Это требование будет выполнено согласно рассуждениям на стр. 45, если только постоянная  $\hbar$  будет вещественным числом (при условии, что она введена в формулы, как это сделано нами, со множителем  $i$ ). Таким образом, мы пришли к следующему определению квантовых скобок Пуассона  $[u, v]$  для двух переменных  $u$  и  $v$

$$uv - vu = i\hbar [u, v], \quad (7)$$

где  $\hbar$  есть новая универсальная постоянная, имеющая размерность действия. Для того чтобы теория согласовалась с опытом, следует положить постоянную  $\hbar$  равной  $\hbar/2\pi$ , где  $\hbar$  есть универсальная постоянная, введенная Планком, так называемая постоянная Планка. Легко проверить, что квантовые СП удовлетворяют условиям (2)—(6).

Задача о нахождении квантовых условий сводится теперь к задаче об определении СП в квантовой механике. Близкое сходство между квантовой СП, определяемой уравнением (7), и классической СП, определяемой уравнением (1), наводит нас на предположение, что квантовые СП или, во всяком случае, самые простые из них, имеют те же значения, что и соответствующие классические СП. Простейшими СП являются те, в которые входят сами канонические координаты



наты и импульсы; в классической теории они имеют следующие значения:

$$\left. \begin{aligned} [q_r, q_s] &= 0, & [p_r, p_s] &= 0, \\ [q_r, p_s] &= \delta_{rs}. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Поэтому мы предположим, что соответствующие квантовые СП также имеют значения (8). Исключая квантовые СП с помощью формулы (7), получаем уравнения

$$\left. \begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r &= 0, & p_r p_s - p_s p_r &= 0, \\ q_r p_s - p_s q_r &= i\hbar \delta_{rs}, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

которые являются *основными квантовыми условиями*. Они показывают нам, в чем именно заключается некоммутативность канонических координат и импульсов. Эти условия дают нам также основу для нахождения перестановочных соотношений между другими динамическими переменными. Например, если  $\xi$  и  $\eta$  — любые две функции координат  $q$  и импульсов  $p$ , которые можно разложить в степенные ряды, то мы можем, применяя повторно формулы (2)–(5), выразить перестановочное соотношение  $\xi\eta - \eta\xi$  или СП  $[\xi, \eta]$  через элементарные СП (8) и, тем самым, вычислить эти выражения. В простых случаях результат часто не отличается от классического или же отличается от классического результата лишь тем, что требуется соблюдать определенный порядок множителей в произведении, порядок, который в классической теории, очевидно, несуществен. Даже если  $\xi$  и  $\eta$  являются более общими функциями канонических переменных  $q$  и  $p$ , неразложимыми в степенные ряды, то уравнений (9) все же достаточно, чтобы определить значение  $\xi\eta - \eta\xi$ , как это будет ясно из дальнейшего. Таким образом, уравнения (9) дают решение задачи о нахождении квантовых условий для всех динамических систем, для которых имеются классические аналоги и которые можно описывать с помощью канонических координат и импульсов. Сюда входят, однако, не все возможные квантовомеханические системы.

Уравнения (7) и (9) образуют основу для проведения аналогии между квантовой и классической механикой. Они показывают, что *классическую механику можно рассматривать как предельный случай квантовой, когда постоянная  $\hbar$  стремится к нулю*. В квантовой механике СП является

чисто алгебраическим понятием, и поэтому она является чем-то более фундаментальным, чем классическая СП, которую можно определить лишь со ссылкой на определенный набор канонических координат и импульсов. По этой причине канонические координаты и импульсы имеют в квантовой механике меньшее значение, чем в классической механике; в самом деле, в квантовой механике возможна система, для которой не существует канонических координат и импульсов, а СП тем не менее имеют смысл. Такая система не будет иметь классического аналога, и мы не можем поэтому получить для нее квантовые условия описанным здесь методом.

Из уравнений (9) видно, что две переменные с разными значками  $r$  и  $s$  всегда коммутируют. Отсюда следует, что любая функция переменных  $q_r$  и  $p_r$  будет коммутировать с любой функцией  $q_s$  и  $p_s$ , если  $r \neq s$ . Различные значения  $r$  соответствуют различным степеням свободы динамической системы, так что мы получаем результат: *динамические переменные, относящиеся к разным степеням свободы, коммутируют*. Мы вывели этот закон из формул (9) и поэтому он справедлив только для динамических систем, обладающих классическим аналогом, однако мы предположим, что закон справедлив и в общем случае. Таким образом, можно подойти к решению задачи о нахождении квантовых условий для систем, у которых не существует канонических координат и импульсов, если только можно придать смысл различным степеням свободы системы в соответствии с ее физической природой.

Теперь становится ясным физический смысл обсуждавшегося в конце предыдущего параграфа подразделения динамических переменных на группы, в которых каждый член одной группы коммутирует с каждым членом другой. Каждая из этих групп соответствует определенным степеням свободы или только одной степени свободы. Это подразделение может соответствовать физическому процессу разделения динамической системы на составные части, причем каждая из частей может существовать сама по себе как физическая система, а если привести эти системы во взаимодействие друг с другом, то снова получится исходная система. Это же подразделение может быть и просто математической процедурой разделения динамической системы на степени свободы, которые не могут быть разделены физи-

чески; так, например, система, состоящая из частицы, имеющей внутреннюю структуру, может быть разделена на степени свободы, описывающие движение центра частицы и степени свободы, описывающие внутреннюю структуру.

## § 22. Шредингеровское представление

Рассмотрим динамическую систему с  $n$  степенями свободы, имеющую классический аналог и, следовательно, описываемую каноническими координатами и импульсами  $q_r, p_r$  ( $r = 1, 2, \dots, n$ ). Предположим, что все координаты  $q_r$  являются наблюдаемыми и имеют сплошной спектр собственных значений, — эти предположения являются естественными, если иметь в виду физический смысл координат  $q_r$ . Введем представление, в котором координаты  $q$  диагональны. Возникает вопрос, будут ли эти координаты образовывать полный набор коммутирующих наблюдаемых для данной динамической системы. Это предположение кажется довольно очевидным. Мы примем, что это действительно так, а в дальнейшем это предположение будет обосновано (см. стр. 127). Если координаты  $q$  образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, то представление при помощи координат полностью определено с точностью до произвольных фазовых множителей.

Рассмотрим сначала случай, когда  $n = 1$ , так что имеется только одна координата  $q$  и импульс  $p$ , удовлетворяющие уравнению

$$qp - pq = i\hbar. \quad (10)$$

Произвольный кет-вектор может быть записан с помощью стандартного кет-вектора в виде  $\psi(q)\rangle$ . Из этого кет-вектора можно построить кет  $d\psi/dq\rangle$ , представителем которого будет производная исходного представителя. Этот новый вектор линейным образом зависит от исходного кет-вектора, и получается, таким образом, в результате действия некоторого линейного оператора на исходный кет. Обозначая этот линейный оператор через  $d/dq$ , имеем

$$\frac{d}{dq} \psi\rangle = \frac{d\psi}{dq}\rangle. \quad (11)$$

Уравнение (11), справедливое для любой функции  $\psi$ .

определяет оператор  $d/dq$ . Имеем

$$\frac{d}{dq} \rangle = 0. \quad (12)$$

Будем рассматривать линейный оператор  $d/dq$  в соответствии с общей теорией линейных операторов, построенной в § 7. Тогда мы можем подействовать этим оператором на бра-вектор  $\langle \varphi(q)$ , причем, согласно формуле (3) § 7, произведение  $\langle \varphi d/dq$  определяется формулой

$$\left\{ \langle \varphi \frac{d}{dq} \right\} \psi = \langle \varphi \left\{ \frac{d}{dq} \psi \right\} \right\}, \quad (13)$$

где  $\psi$  — любая функция. Переходя к представителям, имеем

$$\int \langle \varphi \frac{d}{dq} | q' \rangle dq' \psi(q') = \int \varphi(q') dq' \frac{d\psi(q')}{dq'}. \quad (14)$$

Правую часть уравнения можно проинтегрировать по частям. Получаем

$$\int \langle \varphi \frac{d}{dq} | q' \rangle dq' \psi(q') = - \int \frac{d\varphi(q')}{dq'} dq' \psi(q'), \quad (15)$$

предполагая, что внеинтегральный член обращается в нуль. Отсюда имеем

$$\langle \varphi \frac{d}{dq} | q' \rangle = - \frac{d\varphi(q')}{dq'}.$$

Из этой формулы следует равенство

$$\langle \varphi \frac{d}{dq} = - \langle \frac{d\varphi}{dq}. \quad (16)$$

Таким образом, оператор  $d/dq$ , действуя влево на комплексно-сопряженную волновую функцию, имеет смысл оператора дифференцирования по  $q$ , взятого с обратным знаком.

Справедливость этого результата зависит от того, правилен ли переход от формулы (14) к формуле (15); этот переход возможен, если ограничиться такими бра и кет, для которых соответствующие волновые функции удовлетворяют требуемым граничным условиям. Таким условием, которое обычно выполняется практически, является обращение волновой функции в нуль на границах. (Несколько более общие условия будут приведены в следующем параграфе.)

рафе). Эти условия не ограничивают физической применимости теории, а напротив, они обычно необходимы также и из физических соображений. Например, если  $q$  есть декартова координата частицы, то ее собственные значения пробегают все значения от  $-\infty$  до  $+\infty$ , и из физического условия, что вероятность нахождения частицы на бесконечности равна нулю, следует, что волновая функция должна обращаться в нуль при  $q = \pm \infty$ .

Оператор, комплексно-сопряженный оператору  $d/dq$ , можно вычислить, если учесть, что, согласно формуле (16), вектор, сопряженный вектору  $d/dq \cdot \psi$  или  $d\psi/dq$ , имеет вид  $\langle d\bar{\psi}/dq$  или  $-\langle \bar{\psi} d/dq$ . Таким образом, оператором, сопряженным оператору  $d/dq$ , будет  $-d/dq$ , т. е.  $d/dq$  есть чисто-мнимый линейный оператор.

Чтобы получить представитель оператора  $d/dq$ , воспользуемся формулой (63) § 20. Получаем

$$|q''\rangle = \delta(q - q''). \quad (17)$$

Далее имеем

$$\frac{d}{dq} |q''\rangle = \frac{d}{dq} \delta(q - q''), \quad (18)$$

а отсюда следует равенство

$$\langle q' | \frac{d}{dq} | q'' \rangle = \frac{d}{dq'} \delta(q' - q''). \quad (19)$$

Представитель оператора  $d/dq$  выражается через производную от дельта-функции.

Выведем перестановочные соотношения между операторами  $d/dq$  и  $q$ . Имеем

$$\frac{d}{dq} q\psi = \frac{dq\psi}{dq} = q \frac{d}{dq} \psi + \psi. \quad (20)$$

Поскольку это равенство справедливо для любого кет-вектора  $\psi$ , получаем

$$\frac{d}{dq} q - q \frac{d}{dq} = 1. \quad (21)$$

Сравнивая этот результат с формулой (10), мы видим, что оператор  $-i\hbar d/dq$  удовлетворяет тому же самому перестановочному соотношению с координатой  $q$ , что и импульс  $p$ .

Чтобы обобщить предыдущее рассуждение на случай произвольного числа  $n$  степеней свободы, запишем произвольный кет-вектор в виде  $\psi(q_1 \dots q_n) = \psi$  и введем  $n$  ли-

нейных операторов  $\partial/\partial q_r$  ( $r = 1, \dots, n$ ), которые могут действовать на этот вектор в соответствии с формулой

$$\frac{\partial}{\partial q_r} \psi \rangle = \frac{\partial \psi}{\partial q_r} \rangle, \quad (22)$$

аналогичной уравнению (11). Формула, аналогичная (12), имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial q_r} \rangle = 0. \quad (23)$$

Если ограничиться только такими бра-векторами и кет-векторами, которым соответствуют волновые функции с должными граничными условиями, то эти линейные операторы могут действовать также и на кет-векторы согласно формуле

$$\langle \varphi \frac{\partial}{\partial q_r} = - \langle \frac{\partial \varphi}{\partial q_r}, \quad (24)$$

аналогичной формуле (16). Таким образом, операторы  $\partial/\partial q_r$  могут действовать влево на комплексно-сопряженную волновую функцию; при этом они имеют смысл операторов частного дифференцирования по  $q_r$  с обратным знаком. Мы получаем, как и ранее, что каждый из линейных операторов  $\partial/\partial q_r$  является чисто мнимым. Аналогично формуле (21) перестановочные соотношения имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial q_r} q_s - q_s \frac{\partial}{\partial q_r} = \delta_{rs}. \quad (25)$$

Далее имеем

$$\frac{\partial}{\partial q_r} \frac{\partial}{\partial q_s} \psi \rangle = \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_r \partial q_s} \rangle = \frac{\partial}{\partial q_s} \frac{\partial}{\partial q_r} \psi \rangle, \quad (26)$$

откуда следует равенство

$$\frac{\partial}{\partial q_r} \frac{\partial}{\partial q_s} = \frac{\partial}{\partial q_s} \frac{\partial}{\partial q_r}. \quad (27)$$

Сравнивая (25) и (27) с формулой (9), получаем, что *линейные операторы*  $-i\hbar \partial/\partial q_r$  *удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям с координатами*  $q$ , *что и импульсы*  $p$ .

Не приходя к противоречию, было бы возможно положить

$$p_r = -i\hbar \partial/\partial q_r. \quad (28)$$

Эта возможность позволяет заключить, что координаты  $q$  должны составлять полный набор коммутирующих наблюдаемых. В самом деле это означает, что любую функцию от координат  $q$  и импульсов  $p$  можно рассматривать как функцию от операторов  $q$  и  $-i\hbar \partial/\partial q$  и, таким образом, эта функция будет коммутировать со всеми  $q$  только в том случае, если она будет являться функцией одних координат  $q$ .

Уравнение (28) не является единственно возможным. Однако, во всяком случае, каждая из величин  $p_r + i\hbar \partial/\partial q_r$  должна коммутировать со всеми  $q$ , и, следовательно, она является функцией одних координат  $q$  согласно теореме 2 § 19. Таким образом,

$$p_r = -i\hbar \partial/\partial q_r + f_r(q). \quad (29)$$

Так как операторы  $p_r$  и  $-i\hbar \partial/\partial q_r$  вещественны, то и функции  $f_r(q)$  должны быть вещественными. Для любой функции  $f$  от координат  $q$  имеем

$$\frac{\partial}{\partial q_r} f \psi = f \frac{\partial}{\partial q_r} \psi + \frac{\partial f}{\partial q_r} \psi,$$

откуда следует равенство

$$\frac{\partial}{\partial q_r} f - f \frac{\partial}{\partial q_r} = \frac{\partial f}{\partial q_r}. \quad (30)$$

Используя формулу (29), мы можем теперь получить общую формулу

$$p_r f - f p_r = -i\hbar \partial f / \partial q_r. \quad (31)$$

Эта формула может быть записана с помощью СП в виде

$$[f, p_r] = \partial f / \partial q_r. \quad (32)$$

Такую же формулу мы получаем и из классической теории, что видно из определения (1). Умножая уравнение (27) на  $(-i\hbar)^2$  и подставляя вместо  $-i\hbar \partial/\partial q_r$  и  $-i\hbar \partial/\partial q_s$  их значения по формуле (29), получаем

$$(p_r - f_r)(p_s - f_s) = (p_s - f_s)(p_r - f_r).$$

Эта формула сводится, с помощью квантового условия  $p_r p_s = p_s p_r$ , к формуле

$$p_r f_s + f_r p_s = p_s f_r + f_s p_r.$$

Далее, используя формулу (31), получаем

$$\partial f_s / \partial q_r = \partial f_r / \partial q_s, \quad (33)$$

откуда видно, что все функции  $f_r$  должны иметь вид

$$f_r = \partial F / \partial q_r, \quad (34)$$

причем функция  $F$  не зависит от  $r$ . Тогда уравнение (29) принимает вид

$$p_r = -i\hbar \partial / \partial q_r + \partial F / \partial q_r. \quad (35)$$

Представление, в котором мы вели рассмотрение, определялось лишь тем, что все координаты  $q$  должны быть в нем диагональны, однако при этом остается еще произвол в выборе фазовых множителей. Если изменить фазовые множители, то изменятся также и операторы  $\partial / \partial q_r$ . Покажем теперь, что, выбрав должным образом фазовые множители, можно обратить в нуль функцию  $F$  в уравнении (35), так что уравнение (28) будет действительно выполняться.

Обозначая звездочкой величины, относящиеся к новому представлению с новыми фазовыми множителями, мы получим следующее соотношение между прежними и новыми базисными бра-векторами:

$$\langle q'_1 \dots q'_n | = e^{i\gamma} \langle q_1 \dots q_n |, \quad (36)$$

где  $\gamma' = \gamma(q')$  — вещественная функция координат  $q'$ . Новый представитель вектора состояния отличается от старого также множителем  $e^{i\gamma'}$ , т. е.  $e^{i\gamma'} \psi \rangle^* = \psi \rangle$ . Отсюда следует соотношение между исходным и новым стандартным кет-вектором

$$\rangle^* = e^{-i\gamma}. \quad (37)$$

Используя уравнение (37), получаем для нового линейного оператора  $(\partial / \partial q_r)^*$  соотношение

$$\left( \frac{\partial}{\partial q_r} \right)^* \psi \rangle^* = \frac{\partial \psi}{\partial q_r} \rangle^* = e^{-i\gamma} \frac{\partial \psi}{\partial q_r},$$

аналогичное соотношению (22). Далее, используя (22), имеем

$$\left( \frac{\partial}{\partial q_r} \right)^* \psi \rangle^* = e^{-i\gamma} \frac{\partial}{\partial q_r} \psi \rangle = e^{-i\gamma} \frac{\partial}{\partial q_r} e^{i\gamma} \psi \rangle^*,$$



откуда следует равенство

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* = e^{-i\gamma} \frac{\partial}{\partial q_r} e^{i\gamma}. \quad (38)$$

Используя уравнение (30), получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* = \frac{\partial}{\partial q_r} + i \frac{\partial \gamma}{\partial q_r}. \quad (39)$$

Если определить функцию  $\gamma$  уравнением

$$F = \hbar \gamma + \text{постоянная}, \quad (40)$$

то формула (35) примет вид

$$p_r = -i\hbar (\partial/\partial q_r)^*. \quad (41)$$

Уравнение (40) определяет  $\gamma$  с точностью до произвольной постоянной; таким образом, представление определено с точностью до произвольного постоянного фазового множителя.

Таким образом, мы видим, что может быть построено представление, в котором координаты  $q$  диагональны и выполняется уравнение (28). Это представление является весьма полезным для многих задач. Назовем его *шредингеровским представлением*, так как именно в этом представлении Шредингер в 1926 г. дал первоначальную формулировку квантовой механики. Шредингеровское представление существует, если только система имеет канонические координаты  $q$  и импульсы  $p$ , и оно определяется этими  $q$  и  $p$  полностью, с точностью до произвольного постоянного фазового множителя. Большим удобством этого представления является то, что оно позволяет непосредственно представить любую алгебраическую функцию от координат  $q$  и импульсов  $p$ , имеющую вид степенного ряда, в форме дифференциального оператора, а именно, если  $f(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$  — такая функция, то в шредингеровском представлении мы имеем

$$\begin{aligned} f(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) = \\ = f(q_1, \dots, q_n, -i\hbar \partial/\partial q_1, \dots, -i\hbar \partial/\partial q_n); \end{aligned} \quad (42)$$

при этом предполагается, что при подстановке  $-i\hbar \partial/\partial q$  вместо импульсов  $p$  мы сохраняем порядок сомножителей в произведениях.

Из уравнений (23) и (28) получаем

$$p_r \rangle = 0. \quad (43)$$

Таким образом, стандартный кет-вектор в шредингеровском представлении обладает тем свойством, что он является общим собственным вектором всех импульсов с нулевыми собственными значениями. Отметим некоторые свойства базисных векторов в шредингеровском представлении. Из уравнения (22) имеем

$$\begin{aligned}\langle q'_1 \dots q'_n \left| \frac{\partial}{\partial q_r} \Psi \right\rangle &= \langle q'_1 \dots q'_n \left| \frac{\partial \Psi}{\partial q_r} \right\rangle = \frac{\partial \Psi(q'_1 \dots q'_n)}{\partial q'_r} = \\ &= \frac{\partial}{\partial q'_r} \langle q'_1 \dots q'_n | \Psi \rangle.\end{aligned}$$

Отсюда получаем

$$\langle q'_1 \dots q'_n \left| \frac{\partial}{\partial q_r} = \frac{\partial}{\partial q'_r} \langle q'_1 \dots q'_n \right|. \quad (44)$$

Таким образом, приходим к формуле

$$\langle q'_1 \dots q'_n | p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r} \langle q'_1 \dots q'_n |. \quad (45)$$

Подобно этому, уравнение (24) приводит к формуле

$$p_r | q'_1 \dots q'_n \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r} | q'_1 \dots q'_n \rangle. \quad (46)$$

### § 23. Импульсное представление

Рассмотрим систему с одной степенью свободы, которая описывается одной координатой  $q$  и импульсом  $p$ , причем собственные значения  $q$  пробегает все значения от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Пусть  $|p'\rangle$  — собственный кет-вектор импульса  $p$ . Используя формулу (45) для случая одной степени свободы, получаем, что представитель этого вектора в шредингеровском представлении удовлетворяет уравнению

$$p' \langle q' | p' \rangle = \langle q' | p | p' \rangle = -i\hbar \frac{d}{dq'} \langle q' | p' \rangle.$$

Решение этого дифференциального уравнения для функции  $\langle q' | p' \rangle$  имеет вид

$$\langle q' | p' \rangle = c' e^{ip'q'/\hbar}, \quad (47)$$

где  $a' = c' (p')$  не зависит от  $q'$ , но может зависеть от  $p'$ .

Представитель  $\langle q' | p' \rangle$  не удовлетворяет упомянутым выше граничным условиям, т. е. не обращается в нуль при  $q' = \pm\infty$ . Это вызывает некоторые затруднения, которые проявляются наиболее непосредственно в том, что не выполняется теорема ортогональности. Возьмем другой собственный кет-вектор  $|p''\rangle$  импульса  $p$  с собственным значением  $p'' \neq p'$ . Представитель его имеет вид

$$\langle q' | p'' \rangle = c'' e^{ip''q'/\hbar}.$$

Мы получим

$$\langle p' | p'' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p' | q' \rangle dq' \langle q' | p'' \rangle = c' c'' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p' - p'')q'/\hbar} dq'. \quad (48)$$

Этот интеграл не является сходящимся согласно обычному определению сходимости. Для того чтобы восстановить порядок в теории, мы примем новое определение сходимости интегралов с бесконечными пределами, аналогичное определению сходимости Чезаро для сумм бесконечных рядов. Согласно этому определению интеграл, как функция верхнего предела  $q'$ , считается равным нулю при  $q'$ , стремящемся к бесконечности, если он имеет при конечных  $q'$  вид  $\cos aq'$  или  $\sin aq'$ , где  $a$  не равно нулю. Иначе говоря, мы производим усреднение по колебаниям интеграла на верхнем пределе. То же самое производится и на нижнем пределе при стремлении его к  $-\infty$ . Отсюда следует, что правая часть уравнения (48) обращается в нуль, если  $p'' \neq p'$ , и теорема ортогональности восстанавливается. Отсюда же следует, что правые части формул (13) и (14) равны между собой, если  $\langle \varphi$  и  $\psi \rangle$  — собственные векторы импульса  $p$ , так что на собственные векторы импульса  $p$  можно действовать оператором  $d/dq$ . Таким образом, граничные условия, которым должен удовлетворять представитель кет-вектора или бра-вектора, обобщаются и допускают колебания представителя типа  $\cos aq'$  или  $\sin aq'$  при  $q'$ , стремящемся к  $+\infty$  или  $-\infty$ .

Для значений  $p''$ , близких к  $p'$ , правая часть формулы (48) содержит дельта-функцию. Для ее вычисления можно воспользоваться формулой

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iax} dx = 2\pi\delta(a), \quad (49)$$

где  $a$  вещественно. Доказать ее можно следующим образом. Формула, очевидно, верна при  $a$ , отличном от нуля, так как обе ее части равны тогда нулю. Далее, для непрерывной функции  $f(a)$  имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(a) da \int_{-g}^g e^{iax} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(a) da 2a^{-1} \sin ag = 2\pi f(0)$$

в пределе при  $g$ , стремящемся к бесконечности. Из несколько более сложных рассуждений следует, что мы получим тот же результат, если подставить вместо пределов  $g$  и  $-g$  пределы  $g_1$  и  $-g_2$  и устремлять независимо  $g_1$  и  $g_2$  к бесконечности. Отсюда следует эквивалентность обеих сторон уравнения (49), если их рассматривать как множители в подынтегральном выражении, что и доказывает формулу.

Используя формулу (49), можно записать соотношение ортогональности (48) в виде

$$\begin{aligned} \langle p' | p'' \rangle &= \overline{c'} c'' 2\pi \delta[(p' - p'')/\hbar] = \overline{c'} c'' \hbar \delta(p' - p'') = \\ &= |c'|^2 \hbar \delta(p' - p''). \end{aligned} \quad (50)$$

Мы получили собственный кет-вектор импульса  $p$  для любого вещественного собственного значения  $p'$ . Представитель этого собственного вектора имеет вид (47). Любой кет  $|X\rangle$  можно разложить по этим собственным кет-векторам импульса  $p$ , так как его представитель  $\langle q' | X \rangle$  может быть разложен по представителям (47) согласно формуле Фурье. Отсюда следует, что импульс  $p$  является наблюдаемой, что согласуется с опытными данными, согласно которым импульс всегда может быть измерен.

Таким образом обнаруживается симметрия между координатой  $q$  и импульсом  $p$ . Каждая из них является наблюдаемой, имеет сплошной спектр собственных значений от  $-\infty$  до  $+\infty$ , и перестановочное соотношение между ними (уравнение (10)) не изменится, если поменять местами  $q$  и  $p$  и заменить  $i$  на  $-i$ . Мы построили представление, в котором координата  $q$  диагональна, а  $p = -i\hbar d/dq$ . Из соображений симметрии следует, что можно также построить представление, в котором импульс  $p$  диагонален, а координата имеет вид

$$q = i\hbar d/dp, \quad (51)$$

причем оператор  $d/dp$  вводится тем же способом, что и оператор  $d/dq$ . Назовем это представление *импульсным представлением*. Это представление менее полезно, чем рассмотренное ранее шредингеровское, по следующей причине. Шредингеровское представление позволяет представить в виде дифференциального оператора такую функцию координаты  $q$  и импульса  $p$ , которая является суммой степенных функций относительно  $p$ , в то время как импульсное представление позволяет сделать то же с суммой степенных функций координаты  $q$ . Между тем важные динамические величины почти всегда являются степенными функциями  $p$  или суммами таких функций и часто не являются степенными функциями от  $q$ . Тем не менее импульсное представление оказывается полезным в ряде задач (см. § 50).

Вычислим функцию преобразования  $\langle q' | p' \rangle$ , связывающую оба представления. Базисные кет-векторы  $|p'\rangle$  импульсного представления являются собственными векторами импульса  $p$ , а их шредингеровские представители  $\langle q' | p' \rangle$  определены формулой (47), причем коэффициенты  $c'$  должны быть выбраны должным образом. Фазовые множители этих базисных кет-векторов нужно выбрать так, чтобы выполнялась формула (51). Проще всего удовлетворить этому условию, используя рассмотренную выше симметрию между  $q$  и  $p$ , из которой следует, что выражение  $\langle q' | p' \rangle$  должно перейти в  $\langle p' | q' \rangle$ , если поменять местами  $q'$  и  $p'$  и заменить  $i$  на  $-i$ . Далее,  $\langle q' | p' \rangle$  равно правой части формулы (47), а  $\langle q' | p' \rangle$  равно комплексно-сопряженному выражению. Отсюда следует, что  $c'$  не зависит от  $p'$ , и, таким образом,  $c'$  есть просто число. Далее должна выполняться формула

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p''),$$

откуда, после сравнения с формулой (50), видно, что  $|c| = h^{-1/2}$ . Произвольный постоянный фазовый множитель в обоих представлениях можно выбрать так, чтобы было  $c = h^{-1/2}$ ; тогда получаем для функции преобразования выражение

$$\langle q' | p' \rangle = h^{-1/2} e^{ip'q'/\hbar}. \quad (52)$$

Предыдущие рассуждения легко обобщить на систему с  $n$  степенями свободы, которая может быть описана  $n$  координатами  $q$  и  $n$  импульсами  $p$ , причем собственные значения каждой из координат пробегают все значения от  $-\infty$

до  $+\infty$ . Тогда каждый из импульсов будет наблюдаемой, собственные значения которой пробегают все значения от  $-\infty$  до  $+\infty$ , причем будет иметь место симметрия между совокупностью координат  $q$  и совокупностью импульсов  $p$ , поскольку перестановочные соотношения остаются инвариантными, если поменять местами каждую из координат  $q_r$  с соответствующим импульсом  $p_r$  и заменить  $i$  на  $-i$ . Может быть построено импульсное представление, в котором импульсы  $p$  диагональны, а каждая из координат имеет вид

$$q_r = i\hbar \partial / \partial p_r. \quad (53)$$

Функция преобразования, связывающая импульсное представление с шредингеровским, будет являться произведением функций преобразования для каждой степени свободы, как это видно из формулы (67) § 20. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} \langle q'_1 q'_2 \dots q'_n | p'_1 p'_2 \dots p'_n \rangle &= \langle q'_1 | p'_1 \rangle \langle q'_2 | p'_2 \rangle \dots \langle q'_n | p'_n \rangle = \\ &= h^{-n/2} e^{\frac{i}{\hbar} (p'_1 q'_1 + p'_2 q'_2 + \dots + p'_n q'_n)}. \end{aligned} \quad (54)$$

## § 24. Принцип неопределенности Гейзенберга

Для системы с одной степенью свободы представители кет-вектора  $|X\rangle$  в шредингеровском и в импульсном представлении связаны между собой следующими соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} \langle p' | X \rangle &= h^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iq'p'/\hbar} dq' \langle q' | X \rangle, \\ \langle q' | X \rangle &= h^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iq'p'/\hbar} dp' \langle p' | X \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

Эти формулы имеют простой смысл. Они показывают, что *каждый из представителей является с точностью до численного множителя амплитудой разложения другого представителя в интеграл Фурье.*

Интересно применить формулы (55) к кет-вектору, для которого шредингеровский представитель является так называемым *волновым пакетом*. Так называется функция, которая весьма мала повсюду, кроме некоторой области  $\Delta q'$ , а в этой области приближенно равна периодической

функции с определенной частотой \*). Если разложить такой волновой пакет в интеграл Фурье, то значение амплитуды разложения будет мало для всех частот, кроме тех, которые близки к этой определенной частоте. Полоса частот, для которых амплитуда разложения заметно отлична от нуля, будет иметь ширину порядка  $1/\Delta q'$ , так как две компоненты Фурье, частоты которых отличаются на эту величину, а фазы — совпадают в середине области  $\Delta q'$ , будут находиться в противофазе на краях этой области и будут таким образом гасить друг друга. Далее, в первом из уравнений (55) переменная  $(2\pi)^{-1}p'/\hbar = p'/h$  играет роль частоты. Поэтому, если  $\langle q' | X \rangle$  имеет вид волнового пакета, то функция  $\langle p' | X \rangle$ , которая является амплитудой разложения этого пакета в интеграл Фурье, будет мала в  $p'$ -пространстве повсюду, кроме некоторой области ширины  $\Delta p' = \hbar/\Delta q'$ .

Воспользуемся теперь физическим толкованием квадрата модуля представителя вектора состояния как вероятности. Мы видим, что наш волновой пакет характеризует состояние, для которого измерение координаты  $q$  почти наверняка дает результат, лежащий в области с шириной  $\Delta q'$ , а измерение  $p$  почти наверняка даст результат, лежащий в области с шириной  $\Delta p'$ . Мы можем сказать, что в этом состоянии координата  $q$  имеет определенное значение с ошибкой порядка  $\Delta q'$ , а импульс  $p$  имеет определенное значение с ошибкой порядка  $\Delta p'$ . Произведение этих ошибок равно

$$\Delta q' \Delta p' \approx \hbar. \quad (56)$$

Поэтому, чем более определенное значение имеет одна из переменных  $q$  или  $p$ , тем менее определенное значение имеет другая. Для системы с несколькими степенями свободы, уравнение (56) применимо к каждой из степеней свободы в отдельности.

Уравнение (56) известно под названием принципа неопределенности Гейзенберга. Оно ясно показывает, в какой мере ограничена возможность одновременно приписывать для какого-либо состояния системы определенные численные значения двум некоммутирующим наблюдаемым, когда этими наблюдаемыми являются канонические координата и импульс. Это же соотношение дает простой пример того, как могут оказаться несовместимыми наблюдения в квантовой

---

\*) Частотой здесь названа величина, обратная длине волны,

механике. Оно показывает также, что классическая механика, приписывающая одновременно определенные численные значения всем наблюдаемым, может оказаться хорошим приближением, когда постоянную  $\hbar$  можно считать пренебрежимо малой величиной. Равенство в формуле (56) достигается только в наиболее благоприятном случае, который имеет место, если представитель состояния имеет вид пакета. Другие виды представителя приведут к значениям  $\Delta q'$  и  $\Delta p'$ , произведение которых больше чем  $\hbar$ .

Принцип неопределенности Гейзенберга показывает, что в пределе, когда одна из величин  $q$  или  $p$  определена однозначно, другая останется полностью неопределенной. Этот же результат можно получить и непосредственно из функции преобразования  $\langle q' | p' \rangle$ . В конце § 18 было показано, что величина  $|\langle q' | p' \rangle|^2 dq'$  пропорциональна вероятности того, что координата  $q$  имеет значение, лежащее в малом промежутке от  $q'$  до  $q' + dq'$  для состояния, в котором импульс  $p$  имеет наверняка значение  $p'$ . Согласно формуле (52) эта вероятность не зависит от  $q'$  при заданном  $dq'$ . Таким образом, если  $p$  наверняка имеет значение  $p'$ , то все значения  $q$  равновероятны. Точно так же, если  $q$  наверняка имеет значение  $q'$ , то равновероятны все значения  $p$ .

Физически очевидно, что состояния, в которых все значения либо координаты, либо импульса равновероятны, не могут быть практически достигнуты — в первом случае из-за ограниченности размеров системы, а во втором случае из-за ограниченности энергии. Таким образом, практически не могут быть достигнуты собственные состояния координаты или импульса. Из рассуждений в конце § 12 уже следовало, что эти собственные состояния недостижимы из-за бесконечной точности, необходимой для их создания; теперь мы пришли к этому же заключению другим путем.

## § 25. Операторы сдвига

К новой точке зрения на некоторые из квантовых условий можно прийти путем изучения операторов сдвига. Эти операторы могут быть введены в теорию, если принять во внимание, что данная в гл. II схема соотношений между состояниями и динамическими переменными является существенно *физической* схемой. Отсюда, в частности, следует, что если некоторые состояния или динамические перемен-



ные связаны определенными соотношениями, то после некоторого определенного сдвига их всех (например, после сдвига на расстояние  $\delta x$  вдоль оси  $x$  декартовой системы координат) новые состояния и динамические переменные должны быть связаны теми же соотношениями.

Сдвиг состояния или наблюдаемой есть физически вполне определенный процесс. Так, например, для того чтобы сдвинуть состояние или наблюдаемую на расстояние  $\delta x$  вдоль оси  $x$ , мы должны просто сдвинуть на расстояние  $\delta x$  вдоль оси  $x$  все приборы, с помощью которых мы создаем это состояние или с помощью которых мы измеряем эту наблюдаемую. Сдвинутые таким образом приборы и определяют сдвинутое состояние или сдвинутую наблюдаемую. Сдвиг динамической переменной должен быть столь же определенным, как и сдвиг наблюдаемой, вследствие тесной математической связи между динамическими переменными и наблюдаемыми. Сдвинутое состояние (сдвинутая наблюдаемая) однозначно определяются несдвинутым состоянием (несдвинутой наблюдаемой), а также направлением и величиной сдвига.

Однако понятие о сдвиге кет-вектора не является столь определенным. Пусть имеется некоторый кет-вектор, характеризующий определенное состояние; мы можем сдвинуть это состояние и получить вполне определенное новое состояние, но этим новым состоянием не будет однозначно определяться наш смещенный кет — им будет определяться только направление смещенного вектора. Мы можем попытаться уточнить это определение, требуя, чтобы длины сдвинутого и несдвинутого векторов были одинаковы, но и при этом однозначная определенность не достигается; произвольным остается фазовый множитель при кет-векторе. С первого взгляда может показаться, что каждый сдвигаемый кет-вектор может иметь независимый фазовый множитель, однако с помощью нижеследующего рассуждения можно убедиться, что этот множитель должен быть одинаков для всех векторов. Воспользуемся тем правилом, что суперпозиционная связь между состояниями должна оставаться неизменной при смещении. Эта связь выражается математически линейным уравнением между кет-векторами, характеризующими состояния, например

$$|R\rangle = c_1 |A\rangle + c_2 |B\rangle, \quad (57)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  — числа. Инвариантность суперпозиционной связи требует, чтобы сдвинутые состояния характеризовались кет-векторами, удовлетворяющими тому же линейному уравнению. Обозначая в нашем случае сдвинутые кет-векторы через  $|Rd\rangle$ ,  $|Ad\rangle$ ,  $|Bd\rangle$ , получаем

$$|Rd\rangle = c_1 |Ad\rangle + c_2 |Bd\rangle. \quad (58)$$

Мы будем считать, что именно такие векторы являются сдвинутыми векторами, а не те, которые при сдвиге умножаются на разные множители и которые после сдвига будут удовлетворять линейному уравнению с коэффициентами, отличными от  $c_1$ ,  $c_2$ . Единственная оставшаяся теперь неопределенность для сдвинутых кет-векторов — это возможность умножения их всех на один и тот же произвольный фазовый множитель.

То условие, что линейные уравнения между кет-векторами остаются инвариантными при сдвиге и что, таким образом, выполняется уравнение типа (58), если справедливо соответствующее уравнение (57), означает, что сдвинутые кет-векторы являются линейными функциями несдвинутых кет-векторов. Таким образом, каждый сдвинутый кет  $|Pd\rangle$  является результатом действия некоторого линейного оператора на соответствующий несдвинутый кет  $|P\rangle$ . Этот результат выражается формулой

$$|Pd\rangle = D |P\rangle, \quad (59)$$

где  $D$  — линейный оператор, не зависящий от кет-вектора  $|P\rangle$  и зависящий только от величины и направления сдвига. Поскольку все сдвинутые кет-векторы могут быть умножены на произвольный фазовый множитель, то и оператор сдвига определен с точностью до этого множителя, равного по модулю единице.

После того как сдвиг кет-векторов определен таким образом (и точно так же, очевидно, определен сдвиг бра-векторов, поскольку они являются сопряженными кет-векторам), мы можем утверждать, что любое символическое уравнение между кет-векторами, бра-векторами и динамическими переменными должно оставаться инвариантным при сдвиге всех входящих в него символов, потому что физический смысл этого уравнения при сдвиге не меняется.

Рассмотрим в качестве примера уравнение

$$\langle Q | P \rangle = c,$$

где  $c$  — некоторое число. Тогда должно выполняться уравнение

$$\langle Qd | Pd \rangle = c = \langle Q | P \rangle. \quad (60)$$

Заменяя в уравнении (59)  $Q$  на  $P$  и переходя к сопряженному уравнению, имеем

$$\langle Qd | = \langle Q | \bar{D}. \quad (61)$$

Таким образом, уравнение (60) можно записать в виде

$$\langle Q | \bar{D}D | P \rangle = \langle Q | P \rangle.$$

Поскольку это равенство выполняется для любых  $\langle Q |$  и  $| P \rangle$ , то мы имеем

$$\bar{D}D = 1, \quad (62)$$

т. е. мы получили общее условие, которому должен удовлетворять оператор  $D$ .

Рассмотрим в качестве второго примера уравнение

$$v | P \rangle = | R \rangle,$$

где  $v$  — динамическая переменная. Тогда, обозначая через  $v_d$  сдвинутую динамическую переменную, приходим к равенству

$$v_d | Pd \rangle = | Rd \rangle.$$

Используя уравнение (59), получаем

$$v_d | Pd \rangle = D | R \rangle = Dv | P \rangle = DvD^{-1} | Pd \rangle.$$

Поскольку кет  $| P \rangle$  произволен, то имеем

$$v_d = DvD^{-1}, \quad (63)$$

откуда видно, что линейный оператор  $D$  определяет не только сдвиг кет-векторов и бра-векторов, но и сдвиг динамических переменных. Отметим, что произвольный численный множитель, равный по модулю единице, который содержится в операторе  $D$ , не влияет на оператор  $v_d$ , и также не влияет на справедливость формулы (62).

Перейдем теперь к бесконечно малому сдвигу, т. е. будем рассматривать сдвиг вдоль оси  $x$  на расстояние  $\delta x$  и устремим  $\delta x$  к нулю. Из соображений физической непрерывности мы будем предполагать, что сдвинутый кет  $| Pd \rangle$  будет стремиться к исходному вектору  $| P \rangle$ , и, далее, мы

можем ожидать, что существует предел

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{|Pd\rangle - |P\rangle}{\delta x} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{D-1}{\delta x} |P\rangle.$$

Отсюда вытекает, что должен существовать предел

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} (D-1)/\delta x. \quad (64)$$

Пределом этого выражения будет линейный оператор, который мы будем называть оператором сдвига в направлении  $x$  и обозначим его  $d_x$ . Произвольный численный множитель  $e^{i\gamma}$  (где  $\gamma$  — вещественное число), на который можно умножить оператор  $D$ , должен стремиться к единице при  $\delta x \rightarrow 0$ . Этот множитель приводит таким образом к неопределенности в  $d_x$ ; действительно, оператор  $d_x$  может быть заменен на оператор

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} (De^{i\gamma} - 1)/\delta x = \lim_{\delta x \rightarrow 0} (D - 1 + i\gamma)/\delta x = d_x + ia_x,$$

где  $a_x$  есть предел величины  $\gamma/\delta x$ . Таким образом, оператор  $d_x$  содержит произвольную чисто мнимую аддитивную постоянную. При малых  $\delta x$  имеем

$$D = 1 + \delta x d_x. \quad (65)$$

Подставляя это выражение в формулу (62), получаем

$$(1 + \delta x \bar{d}_x)(1 + \delta x d_x) = 1.$$

Пренебрегая величиной  $(\delta x)^2$ , приходим к формуле

$$\delta x (\bar{d}_x + d_x) = 0.$$

Таким образом, оператор  $d_x$  является чисто мнимым. Подставляя выражение (65) в формулу (63) и снова пренебрегая величинами  $(\delta x)^2$ , получаем

$$v_d = (1 + \delta x d_x) v (1 - \delta x d_x) = v + \delta x (d_x v - v d_x), \quad (66)$$

откуда следует формула

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} (v_d - v)/\delta x = d_x v - v d_x. \quad (67)$$

Мы можем описывать всякую динамическую систему с помощью следующих динамических переменных: декартовы координаты  $x$ ,  $y$ ,  $z$  центра инерции системы, компоненты

$p_x, p_y, p_z$  полного импульса системы, которые являются переменными канонически сопряженными  $x, y, z$ , и другие динамические переменные, необходимые для описания внутренних степеней свободы системы. Если мы предположим, что прибор, предназначенный для измерения координаты  $x$ , смещен вдоль оси  $x$  на расстояние  $\delta x$ , то он будет измерять величину  $x - \delta x$ , следовательно,

$$x_d = x - \delta x.$$

Подставляя в формулу (66)  $x$  вместо  $v$ , получаем

$$d_x x - x d_x = -1. \quad (68)$$

Мы получили квантовое условие, связывающее  $d_x$  и  $x$ . С помощью таких же рассуждений мы находим, что переменные  $y, z, p_x, p_y, p_z$  и внутренние динамические переменные, которые не меняются при сдвиге, должны коммутировать с оператором  $d_x$ . Сравнивая этот результат с формулой (9), мы видим, что оператор  $i\hbar d_x$  удовлетворяет тем же самым квантовым условиям, что и оператор импульса  $p_x$ . Их разность  $p_x - i\hbar d_x$  коммутирует со всеми динамическими переменными и, следовательно, должна быть числом. Это число обязательно должно быть вещественным, так как операторы  $p_x$  и  $i\hbar d_x$  — вещественны, и оно может быть обращено в нуль путем соответствующего выбора произвольного чисто-мнимого числа, которое может быть добавлено к оператору  $d_x$ . Таким образом, мы получаем результат

$$p_x = i\hbar d_x, \quad (69)$$

т. е. компонента по оси  $x$  от полного импульса системы равна оператору сдвига  $d_x$ , умноженному на  $i\hbar$ .

Это — основной результат, позволяющий придать новый смысл операторам сдвига. Аналогичные результаты получаются, конечно, и для операторов сдвига  $d_y, d_z$  вдоль осей  $y, z$ . Квантовые условия, гласящие, что  $p_x, p_y$  и  $p_z$  коммутируют между собой, связаны, как это теперь видно, с тем фактом, что сдвиги в различных направлениях являются коммутирующими операциями.

## § 26. Унитарные преобразования

Пусть  $U$  — какой-то линейный оператор, для которого существует обратный оператор  $U^{-1}$ . Рассмотрим уравнение

$$\alpha^* = U \alpha U^{-1}, \quad (70)$$

где  $\alpha$  — произвольный линейный оператор. Это уравнение можно рассматривать как правило, по которому любой линейный оператор  $\alpha$  преобразуется в соответствующий линейный оператор  $\alpha^*$ . С этой точки зрения уравнение (70) имеет довольно любопытные свойства. Прежде всего следует отметить, что каждый оператор  $\alpha^*$  имеет те же самые собственные значения, что и соответствующий оператор  $\alpha$ . Действительно, если  $\alpha'$  — собственное значение оператора  $\alpha$  и  $|\alpha'\rangle$  — соответствующий собственный кет-вектор, то

$$\alpha |\alpha'\rangle = \alpha' |\alpha'\rangle,$$

а отсюда следует

$$\alpha^* U |\alpha'\rangle = U \alpha U^{-1} U |\alpha'\rangle = U \alpha |\alpha'\rangle = \alpha' U |\alpha'\rangle.$$

Таким образом, кет  $U |\alpha'\rangle$  является собственным кет-вектором оператора  $\alpha^*$  с тем же самым собственным значением. Точно так же можно показать, что любое собственное значение оператора  $\alpha^*$  будет также собственным значением  $\alpha$ . Далее, если ввести различные операторы  $\alpha$ , связанные алгебраическими уравнениями, и преобразовать их всех по формуле (70), то соответствующие операторы  $\alpha^*$  будут удовлетворять тем же алгебраическим уравнениям. Этот результат следует из того факта, что основные алгебраические действия — сложение и умножение — остаются инвариантными при преобразовании (70), как видно из следующих уравнений:

$$\begin{aligned} (\alpha_1 + \alpha_2)^* &= U (\alpha_1 + \alpha_2) U^{-1} = U \alpha_1 U^{-1} + U \alpha_2 U^{-1} = \alpha_1^* + \alpha_2^*, \\ (\alpha_1 \alpha_2)^* &= U \alpha_1 \alpha_2 U^{-1} = U \alpha_1 U^{-1} U \alpha_2 U^{-1} = \alpha_1^* \alpha_2^*. \end{aligned}$$

Посмотрим теперь, какое условие будет наложено на оператор  $U$ , если потребовать, чтобы всякий вещественный оператор  $\alpha$  переходил в вещественный же оператор  $\alpha^*$ . Уравнение (70) можно записать в виде

$$\alpha^* U = U \alpha. \quad (71)$$

Заменяя правую и левую части уравнения (8) на комплексно-сопряженные и используя формулу (5) § 8, получаем, считая, что  $\alpha$  и  $\alpha^*$  вещественны,

$$\bar{U} \alpha^* = \alpha \bar{U}. \quad (72)$$

Из уравнений (71) и (72) получаем соответственно

$$\bar{U}\alpha^*U = \bar{U}U\alpha, \quad \bar{U}\alpha^*U = \alpha\bar{U}U.$$

Отсюда имеем

$$\bar{U}U\alpha = \alpha\bar{U}U.$$

Итак, оператор  $\bar{U}U$  коммутирует с любым вещественным линейным оператором, а следовательно, и с любым линейным оператором вообще, так как любой оператор может быть представлен в виде суммы некоторого вещественного оператора и другого вещественного оператора, помноженного на  $i$ . Отсюда следует, что оператор  $\bar{U}U$  является числом. Оно, очевидно, является вещественным, так как комплексно-сопряженная величина, согласно формуле (5) § 8, равна тому же числу. Кроме того, это число является положительным, поскольку число  $\langle P | \bar{U}U | P \rangle$ , где  $|P\rangle$  — произвольный кет, положительно, так же как и число  $\langle P | P \rangle$ . Мы можем положить его равным единице, не ограничивая при этом общности преобразования (70). Тогда имеем

$$\bar{U}U = 1. \quad (73)$$

Уравнение (73) можно записать в любом из следующих видов:

$$U = \bar{U}^{-1}, \quad \bar{U} = U^{-1}, \quad U^{-1}\bar{U}^{-1} = 1. \quad (74)$$

Матрица или линейный оператор  $U$ , удовлетворяющие условиям (73), (74), называются *унитарной матрицей* и *унитарным оператором*, а само преобразование (70) — *унитарным преобразованием*. Унитарное преобразование переводит вещественные линейные операторы в вещественные же и оставляет инвариантными любые алгебраические соотношения между линейными операторами. Его можно считать применимым также к кет-векторам и бра-векторам, а именно,

$$|P^*\rangle = U |P\rangle, \quad \langle P^*| = \langle P| \bar{U} = \langle P| U^{-1}. \quad (75)$$

Из этих формул следует, что унитарное преобразование оставляет инвариантным любое алгебраическое соотношение между линейными операторами, кет-векторами и бра-векторами. Оно преобразует собственные векторы операторов  $\alpha$  в собственные векторы операторов  $\alpha^*$ . Отсюда легко получить, что оно преобразует наблюдаемую в наблю-

даемую и оставляет инвариантным любое функциональное соотношение между наблюдаемыми, основанное на общем определении функции, которое дано в § 11.

Преобразование, обратное унитарному, является также унитарным, поскольку, согласно формуле (74), оператор  $U^{-1}$  будет унитарным, если унитарен оператор  $U$ . Далее, если последовательно произвести два унитарных преобразования, то в результате мы получим третье унитарное преобразование. Это можно проверить следующим образом. Пусть одно из унитарных преобразований определяется формулой (70), а второе — формулой

$$\alpha^+ = V\alpha^*V^{-1}.$$

Тогда связь между  $\alpha^+$  и  $\alpha$  имеет вид

$$\alpha^+ = VU\alpha U^{-1}V^{-1} = (VU)\alpha(VU)^{-1} \quad (76)$$

согласно формуле (42) § 11. Далее, оператор  $VU$  унитарен; действительно,

$$\overline{VUVU} = \overline{U} \overline{V} VU = \overline{U}U = 1,$$

и, таким образом, преобразование (76) является унитарным.

Рассмотренное в предыдущем параграфе преобразование от несдвинутых величин к сдвинутым является примером унитарного преобразования. Это видно из уравнений (62), (63), соответствующих уравнениям (73), (70), и уравнений (59), (61), соответствующих уравнениям (75).

В классической механике можно совершить преобразование от канонических координат и импульсов  $q_r, p_r$  ( $r = 1, \dots, n$ ) к новой совокупности переменных  $q_r^*, p_r^*$  ( $r = 1, \dots, n$ ), для которых скобки Пуассона (СП) имеют те же значения, так что уравнения (8) § 21 остаются справедливыми при замене  $q$  и  $p$  на  $q^*$  и  $p^*$ . Все динамические переменные можно выразить через переменные  $q^*, p^*$ . Тогда переменные  $q^*$  и  $p^*$  можно назвать также каноническими, а само преобразование — касательным преобразованием. Легко убедиться, что значение скобок Пуассона для двух динамических переменных  $u$  и  $v$ , вычисленное по формуле (1) § 21, не изменится, если заменить в этой формуле  $q$  и  $p$  на  $q^*$  и  $p^*$ , так что это значение инвариантно относительно касательного преобразования. Это приводит к тому, что в общей динамической теории новые канонические координаты  $q^*$  и импульсы  $p^*$  во многих отношениях равноправны



со старыми переменными  $q$  и  $p$ , несмотря на то, что новые координаты  $q^*$  могут и не быть обобщенными координатами Лагранжа, а могут зависеть как от координат, так и от скоростей.

Можно показать, что для квантовой динамической системы, имеющей классический аналог, унитарные преобразования квантовой теории являются более общими, чем касательные, так как первые можно применять к таким квантовым системам, которые не имеют аналога в классической теории; аналогия между унитарными и касательными преобразованиями имеет место для тех систем, которые могут быть описаны с помощью канонических координат и импульсов \*).

Чтобы установить эту аналогию, заметим, что унитарное преобразование, примененное к квантовым переменным  $q_r, p_r$ , дает новые переменные  $q_r^*, p_r^*$ , для которых СП имеют те же значения, поскольку СП эквивалентны алгебраическим выражениям (§ 21), а алгебраические выражения остаются инвариантными при унитарном преобразовании. И наоборот, любые вещественные переменные  $q_r^*, p_r^*$ , удовлетворяющие СП для канонических координат и импульсов, связаны с  $q_r, p_r$  унитарным преобразованием, как это можно видеть из следующих аргументов.

Используем представление Шредингера и запишем для краткости базисный кет  $|q_1' \dots q_n'\rangle$  в виде  $|q'\rangle$ . Поскольку мы предполагаем, что  $q_r^*, p_r^*$  удовлетворяют СП для канонических координат и импульсов, то мы можем построить относящееся к ним шредингеровское представление, в котором  $q_r^*$  диагональны, а каждый импульс  $p_r^*$  равен  $-i\hbar\partial/\partial q_r^*$ . Базисные кет-векторы в этом втором шредингеровском представлении будут  $|q_1^{*'} \dots q_n^{*'}\rangle$ ; мы запишем их для краткости в виде  $|q^{*'}\rangle$ . Введем теперь линейный оператор  $U$ , определяемый формулой

$$\langle q^{*'} | U | q' \rangle = \delta(q^{*'} - q'), \quad (77)$$

где  $\delta(q^{*'} - q')$  есть сокращенное обозначение для

$$\delta(q_1^{*'} - q_1') \delta(q_2^{*'} - q_2') \dots \delta(q_n^{*'} - q_n'). \quad (78)$$

\*) В нижеследующем рассуждении сформулированная выше связь между касательными преобразованиями в классической механике и унитарными преобразованиями в квантовой механике фактически не рассматривается. Об этой связи см. далее § 32, а также приложение. (Прим. В. А. Фока.)

Формула, сопряженная (77), имеет вид

$$\langle q' | \bar{U} | q^* \rangle = \delta(q^{*'} - q').$$

Отсюда получаем \*)

$$\begin{aligned} \langle q' | \bar{U} U | q'' \rangle &= \int \langle q' | \bar{U} | q^{*'} \rangle dq^{*'} \langle q^{*'} | U | q'' \rangle = \\ &= \int \delta(q^{*'} - q') dq^{*'} \delta(q^{*'} - q'') = \delta(q' - q''), \end{aligned}$$

так что  $\bar{U}U = 1$ . Таким образом,  $U$  есть унитарный оператор. Далее мы имеем

$$\langle q^{*'} | q_r^* U | q' \rangle = q_r^{*'} \delta(q^{*'} - q')$$

и

$$\langle q^{*'} | U q_r | q' \rangle = \delta(q^{*'} - q') q_r'.$$

Правые части этих равенств равны между собой согласно свойству (11) § 15 дельта-функции, так что

$$q_r^{*'} U = U q_r$$

или

$$q_r^{*'} = U q_r U^{-1}.$$

Аналогично, согласно (45) и (46),

$$\langle q^{*'} | p_r^* U | q' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r^{*'}} \delta(q^{*'} - q'),$$

$$\langle q^{*'} | U p_r | q' \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r'} \delta(q^{*'} - q').$$

Правые части этих уравнений, очевидно, равны, и следовательно,

$$p_r^{*'} U = U p_r$$

или

$$p_r^{*'} = U p_r U^{-1}.$$

Таким образом, условия унитарности преобразования подтверждены.

Мы получим бесконечно малое унитарное преобразование, считая, что оператор  $U$  в формуле (70) отличается бесконечно мало от единицы. Пусть

$$U = 1 + i\varepsilon F,$$

---

\*) Мы обозначаем однократным интегралом и дифференциалом  $dq^{*'}$  интегрирование по всем переменным  $q_1^{*'}, q_2^{*'}, \dots, q_n^{*'}$ . Это сокращенное обозначение будет использоваться и далее.

где  $\varepsilon$  — бесконечно малая величина, квадратом которой можно пренебречь. Тогда

$$U^{-1} = 1 - i\varepsilon F.$$

Из условия унитарности (73) или (74) следует, что оператор  $F$  должен быть вещественным. Тогда уравнение преобразования (70) принимает вид

$$\alpha^* = (1 + i\varepsilon F) \alpha (1 - i\varepsilon F),$$

откуда имеем

$$\alpha^* - \alpha = i\varepsilon (F\alpha - \alpha F). \quad (79)$$

Используя СП, это равенство можно записать в виде

$$\alpha^* - \alpha = \varepsilon \hbar [\alpha, F]. \quad (80)$$

Если  $\alpha$  есть каноническая координата или импульс, то формально это преобразование аналогично классическому бесконечно малому касательному преобразованию.

## ГЛАВА V

### УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

#### § 27. Шредингеровская форма уравнений движения

Начиная с § 5 и до сих пор все наши рассуждения относились только к одному моменту времени. Эти рассуждения привели нас к построению общей схемы соотношений между состояниями и динамическими переменными динамической системы для одного момента времени. Чтобы получить полную динамическую теорию, мы должны рассмотреть также связь между различными моментами времени. Когда производится измерение над динамической системой, то ее состояние меняется непредсказуемым образом, однако в период между измерениями причинность имеет место в квантовой механике так же, как и в классической, и система подчиняется уравнениям движения, которые позволяют по состоянию в один момент времени однозначно определить состояние в последующие моменты времени. К изучению этих уравнений движения мы и перейдем теперь. Они остаются справедливыми до тех пор, пока в результате измерения или аналогичного процесса не произойдет возмущения системы \*). Общая форма уравнений движения может быть получена из принципа суперпозиции, рассмотренного в гл. III.

Рассмотрим некоторое частное состояние движения за время, в течение которого система не испытывает возмущения извне. Состояние в момент  $t$  будет характеризоваться некоторым кет-вектором, зависящим от  $t$ , который мы обозначим через  $|t\rangle$ . Если мы будем иметь дело с несколькими такими состояниями движения, то мы будем различать их,

---

\*) Процессом такого рода является приготовление состояния. Часто такое приготовление состоит в измерении какой-либо наблюдаемой данной физической системы и выделении тех случаев, когда результат измерения совпадает с некоторым наперед заданным числом,

вводя дополнительные значки, например  $A$ , и будем обозначать кет, характеризующий это состояние,  $|At\rangle$ . Требование, чтобы состояние в один момент времени определяло состояние в другой момент времени, означает, что кет  $|At_0\rangle$  определяет с точностью до численного множителя кет  $|At\rangle$ . Принцип суперпозиции справедлив для этих состояний движения в течение всего времени, пока система не испытывает возмущения. Он гласит, что если в момент  $t_0$  имеет место суперпозиционная связь между некоторыми состояниями, которая приводит к линейному уравнению между соответствующими кет-векторами, например к уравнению

$$|Rt_0\rangle = c_1 |At_0\rangle + c_2 |Bt_0\rangle,$$

то эта же связь должна иметь место между состояниями движения в течение всего времени, пока система не испытывает возмущений. Поэтому то же самое линейное соотношение должно быть справедливо для кет-векторов, характеризующих эти состояния в любой момент  $t$  (из промежутка времени, в течение которого система не испытывает возмущения), т. е. в данном случае должно выполняться уравнение

$$|Rt\rangle = c_1 |At\rangle + c_2 |Bt\rangle,$$

если только выбрать должным образом произвольные численные множители при этих векторах. Отсюда следует, что кет-векторы  $|Pt\rangle$  зависят линейным образом от кет-векторов  $|Pt_0\rangle$  и каждый кет  $|Pt\rangle$  является результатом действия некоторого линейного оператора на кет  $|Pt_0\rangle$ . В наших обозначениях получаем

$$|Pt\rangle = T |Pt_0\rangle, \quad (1)$$

где  $T$  — линейный оператор, не зависящий от  $P$  и зависящий только от  $t$  (и от  $t_0$ ).

Предположим теперь, что все  $|Pt\rangle$  имеют ту же длину, что и  $|Pt_0\rangle$ . Не всегда возможно выбрать произвольные численные множители, на которые можно умножать векторы  $|Pt\rangle$  так, чтобы это предположение выполнялось. Таким образом, это новое предположение является физическим, а не является просто вопросом обозначений. Оно представляет собой некоторое уточнение принципа суперпозиции. Тогда в векторе  $|Pt\rangle$  остается произвольным только фазовый множитель, который не должен зависеть от  $|Pt\rangle$  для того, чтобы

сохранялась линейная зависимость  $|Pt\rangle$  от  $|Pt_0\rangle$ . Из того условия, что длина вектора  $c_1|Pt\rangle + c_2|Qt\rangle$  должна быть равна длине вектора  $c_1|Pt_0\rangle + c_2|Qt_0\rangle$  при любых значениях комплексных чисел  $c_1$  и  $c_2$ , мы получаем формулу

$$\langle Qt|Pt\rangle = \langle Qt_0|Pt_0\rangle. \quad (2)$$

Связь между кет-векторами  $|Pt\rangle$  и  $|Pt_0\rangle$  формально аналогична связи между сдвинутым и несдвинутым векторами, которую мы имели в § 25, с той лишь разницей, что здесь идет речь о сдвиге во времени вместо рассмотренного в § 25 пространственного сдвига. Уравнения (1) и (2) играют в данном случае роль уравнений (59) и (60) из § 25. Далее можно повторить рассуждения § 25 и доказать, что оператор  $T$  определен с точностью до произвольного численного множителя и удовлетворяет условию

$$\bar{T}T = 1, \quad (3)$$

аналогичному условию (62) § 25. Таким образом, оператор  $T$  унитарен. Перейдем к бесконечно малому сдвигу, устремляя  $t$  к  $t_0$ , и предположим, что в соответствии с условием физической непрерывности существует предел

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \frac{|Pt\rangle - |Pt_0\rangle}{t - t_0}.$$

Этот предел есть просто производная от  $|Pt_0\rangle$  по  $t_0$ . Согласно уравнению (1) он равен

$$\frac{d|Pt_0\rangle}{dt_0} = \left\{ \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{T - 1}{t - t_0} \right\} |Pt_0\rangle. \quad (4)$$

Получающийся в пределе линейный оператор является чистым, так же как это было в формуле (64), и, кроме того, он определен лишь с точностью до чисто-мнимой произвольной аддитивной постоянной. Если обозначить этот оператор, умноженный на  $i\hbar$ , через  $H$ , или лучше через  $H(t_0)$  (он может зависеть от  $t_0$ ), то уравнение (4) примет для произвольных  $t$  вид

$$i\hbar \frac{d|Pt\rangle}{dt} = H(t) |Pt\rangle. \quad (5)$$

Уравнение (5) дает общий закон изменения со временем кет-вектора, характеризующего состояние системы. Это — *шредингеровская форма уравнений движения*. В уравнение

входит только один оператор  $H(t)$ , который должен быть характерным для рассматриваемой динамической системы. Мы предположим, что  $H(t)$  есть полная энергия системы. Для такого предположения есть два основания: а) аналогия с классической механикой, которая будет развита в следующем параграфе; б) оператор  $H(t)$  определен нами как умноженный на  $i\hbar$  оператор сдвига во времени, подобный операторам сдвига в направлениях  $x$ ,  $y$  и  $z$  из § 25, поэтому в соответствии с формулой (69) § 25 следует ожидать, что оператор  $H(t)$  равен полной энергии, поскольку из теории относительности следует, что отношение между энергией и временем аналогично отношению между импульсом и координатой.

Мы будем считать на основании физических соображений, что полная энергия системы всегда является наблюдаемой. Для изолированной системы она постоянна, и ее можно обозначать просто  $H$ . В тех случаях, когда энергия не является постоянной, мы будем все же обозначать ее символом  $H$ , подразумевая зависимость от времени. Если энергия зависит от  $t$ , то это значит, что на системы действуют внешние силы. Такое внешнее воздействие следует отличать от возмущения, вносимого измерением, поскольку первое совместимо с причинным описанием системы и с уравнениями движения, а второе — нет.

Связь между операторами  $T$  (в уравнении (1)) и  $H(t)$  можно получить, подставляя в уравнение (5) вместо  $|Pt\rangle$  его значение из уравнения (1). Получаем

$$i\hbar \frac{dT}{dt} |Pt_0\rangle = H(t) T |Pt_0\rangle.$$

Поскольку  $|Pt_0\rangle$  — произвольный кет, то отсюда следует уравнение

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = H(t) T. \quad (6)$$

Уравнение (5) является весьма важным для практических задач, причем оно обычно используется в связи с определенным представлением. Если ввести представление, в котором диагональны коммутирующие наблюдаемые  $\xi$ , образующие полный набор, писать  $\psi(\xi t)$  вместо  $\langle \xi' | Pt \rangle$  и перейти к обозначениям § 20, использующим стандартный кет, то мы получим

$$|Pt\rangle = \psi(\xi t).$$

Уравнение (5) примет тогда вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\xi t) = H\psi(\xi t). \quad (7)$$

Уравнение (7) обычно называется *волновым уравнением Шредингера*, а его решение *волновой функцией, зависящей от времени*. Каждое решение характеризует состояние движения системы, а квадрат его модуля дает вероятность того, что переменные  $\xi$  имеют определенные значения в данный момент времени  $t$ . Для систем, которые можно описывать с помощью канонических координат и импульсов, мы можем использовать шредингеровское представление и тогда оператор  $H$  будет дифференциальным оператором согласно формуле (42) § 22.

## § 28. Гейзенберговская форма уравнений движения

В предыдущем параграфе мы получили наглядное изображение состояний движения системы в отсутствие возмущений, характеризуя каждое такое состояние переменным вектором состояния, так что состояние системы в определенный момент времени характеризуется значением вектора в тот же момент. Такое изображение движения системы мы будем называть *шредингеровской картиной*. Произведем такое унитарное преобразование наших векторов, которое переводит каждый кет  $|a\rangle$  в

$$|a^*\rangle = T^{-1}|a\rangle. \quad (8)$$

Это преобразование имеет тот же вид, что и преобразование (75) § 26, но только *оно зависит от времени  $t$* , поскольку от времени зависит оператор  $T$ . Таким образом, преобразование (8) можно рассматривать как непрерывное движение (вращение и однородную деформацию) всего пространства векторов состояния. Кет, который был первоначально постоянным, становится переменным, его изменение определяется формулой (8), в которой  $|a\rangle$  не зависит от времени. С другой стороны, если взять кет, который первоначально изменялся, характеризуя изменения состояния со временем в отсутствие возмущений, т. е. изменялся согласно уравнению (1), то этот кет после преобразования будет постоянным, потому что после подстановки в формулу (8) вектора



$|Pt\rangle$  вместо  $|a\rangle$ , мы получаем вектор  $|a^*\rangle$ , который не зависит от  $t$ . Таким образом, преобразование переводит зависящие от времени кет-векторы, которые характеризуют состояние движения системы в отсутствие возмущения, в неподвижные кет-векторы.

Этому унитарному преобразованию можно подвергнуть также и бра-векторы и линейные операторы для того, чтобы уравнения между различными величинами остались инвариантны. Преобразование бра-векторов определяется формулой; сопряженной формуле (8), а преобразование операторов — формулой (70) § 26, в которую надо подставить  $T^{-1}$  вместо  $U$ , после чего получаем

$$\alpha^* = T^{-1}\alpha T. \quad (9)$$

Линейный оператор, фиксированный первоначально, становится после преобразования, вообще говоря, переменным, зависящим от времени. Но динамической переменной соответствовал до преобразования оператор, который первоначально вообще не содержал времени; поэтому, после преобразования, этой переменной будет соответствовать зависящий от времени линейный оператор. Преобразование приводит, таким образом, к новому изображению движения, в котором состояния характеризуются неподвижными векторами, а динамические переменные — зависящими от времени линейными операторами. Будем называть это *гейзенберговской картиной движения*.

Физические условия, в которых находится система в некоторый момент времени, характеризуются отношением между динамическими переменными и состоянием системы; изменение физических условий со временем можно приписать либо изменению состояния, считая динамические переменные постоянными, что приводит к шредингеровской картине, либо изменению динамических переменных, считая постоянным состояние — тогда приходим к гейзенберговской картине движения.

В гейзенберговской картине динамические переменные подчиняются уравнениям движения. Рассмотрим динамическую переменную, соответствующую в шредингеровской картине постоянному линейному оператору  $v$ . В гейзенберговской картине ей соответствует переменный линейный оператор, который мы обозначим через  $v_*$  вместо  $v$  для того,

чтобы подчеркнуть его зависимость от  $t$ . Этот оператор имеет вид

$$v_t = T^{-1}vT. \quad (10)$$

Отсюда имеем

$$Tv_t = vT.$$

Дифференцируя это уравнение по  $t$ , получаем

$$\frac{dT}{dt} v_t + T \frac{dv_t}{dt} = v \frac{dT}{dt}.$$

Используя уравнение (6), приходим к формулам

$$HTv_t + i\hbar T \frac{dv_t}{dt} = vHT, \\ i\hbar \frac{dv_t}{dt} = T^{-1}vHT - T^{-1}HTv_t = v_t H_t - H_t v_t, \quad (11)$$

где

$$H_t = T^{-1}HT. \quad (12)$$

Уравнение (11) можно записать иначе, используя определение СП. Тогда

$$\frac{dv_t}{dt} = [v_t, H_t]. \quad (13)$$

Уравнения (11) или (13) показывают, каким образом изменяется со временем динамическая переменная в гейзенберговской картине. Они представляют собой *гейзенберговскую форму уравнений движения*. Эти уравнения движения будут определены, если задать линейный оператор  $H_t$ , получающийся путем преобразования из оператора  $H$ , который мы имели в шредингеровской форме уравнений движения. Таким образом, оператор  $H_t$  соответствует энергии в гейзенберговской картине. Мы будем называть изменяющиеся со временем динамические переменные в гейзенберговской картине — *гейзенберговскими динамическими переменными*, чтобы отличить их от постоянных динамических переменных в шредингеровской картине, которые мы будем называть *шредингеровскими динамическими переменными*. Каждая гейзенберговская динамическая переменная связана с соответствующей шредингеровской переменной уравнением (10). Так как это уравнение представляет унитарное преобразование, то все алгебраические и функциональные соотношения для обоих видов динамических переменных одинаковы. При  $t = t_0$  мы имеем  $T = 1$ , так что  $v_{t_0} = v$ ,

и поэтому любая гейзенберговская динамическая переменная равна при  $t = t_0$  соответствующей шредингеровской переменной.

Уравнение (13) можно сравнить с соответствующими результатами классической механики, где также имеются динамические переменные, изменяющиеся со временем. Уравнения движения классической механики могут быть записаны в гамильтоновой форме

$$\frac{dq_r}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \frac{dp_r}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \quad (14)$$

где  $q$  и  $p$  — канонические координаты и импульсы, а  $H$  — энергия, выраженная как функция от  $q$  и  $p$ , а также, возможно, и от времени  $t$ . Энергия, выраженная таким образом, называется *функцией Гамильтона* или *гамильтонианом*. Для произвольной функции  $v$  от координат  $q$  и импульсов  $p$ , не содержащей явно времени, мы получаем из уравнений (14) соотношение

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= \sum_r \left\{ \frac{\partial v}{\partial q_r} \frac{dq_r}{dt} + \frac{\partial v}{\partial p_r} \frac{dp_r}{dt} \right\} = \\ &= \sum_r \left\{ \frac{\partial v}{\partial q_r} \frac{\partial H}{\partial p_r} - \frac{\partial v}{\partial p_r} \frac{\partial H}{\partial q_r} \right\} = [v, H], \end{aligned} \quad (15)$$

согласно классическому определению СП в уравнении (1) § 21. Это уравнение имеет тот же вид, что и уравнение (13) в квантовой теории. Мы получили таким образом аналогию между классическими уравнениями движения в форме Гамильтона и квантовыми уравнениями движения в форме Гейзенберга. Эта аналогия подтверждает наше предположение, что линейный оператор  $H$ , введенный в предыдущем параграфе, является в квантовой механике оператором энергии системы.

В классической механике динамическая система определена математически, если задана ее функция Гамильтона, т. е. если дана энергия как функция канонических координат и импульсов. Этого достаточно, чтобы получить уравнения движения. В квантовой механике система определена математически, если энергия выражена через динамические переменные, перестановочные соотношения между которыми нам известны, — этого также достаточно, чтобы получить уравнения движения как в форме Шредингера,

так и в форме Гейзенберга. При этом нам нужно, чтобы либо оператор  $H$  был выражен через шредингеровские динамические переменные, либо же чтобы оператор  $H_t$  был выражен через гейзенберговские переменные. Функциональная зависимость будет, очевидно, в обоих случаях одинакова. Мы будем называть энергию, выраженную таким образом, *оператором Гамильтона или гамильтонианом* для того, чтобы сохранить аналогию с классической теорией.

Система в квантовой механике всегда имеет оператор Гамильтона независимо от того, обладает ли система классическим аналогом и может ли она быть описана с помощью канонических координат и импульсов или нет. Но если система обладает классическим аналогом, то ее связь с классической механикой является особенно тесной, и обычно можно предполагать, что гамильтониан в классической и квантовой теории является одной и той же функцией канонических координат и импульсов \*). При этом могло бы возникнуть затруднение, если бы классический гамильтониан содержал произведение множителей, квантовые аналоги которых не коммутируют между собой, ибо тогда было бы неизвестно, в каком порядке расположить эти множители в квантовом гамильтониане. Однако для большинства простейших динамических систем, изучение которых важно в атомной физике, такое затруднение не возникает. Вследствие этого мы можем в большинстве случаев употреблять для описания динамических систем в квантовой теории тот же язык, что и в классической теории (например, можем говорить о частицах с определенными массами, движущихся в заданном поле сил), и если нам дана система в классической механике, то обычно можно придать смысл понятию «той же самой» системы в квантовой механике.

Уравнение (13) справедливо для любой переменной  $u_t$ , являющейся функцией гейзенберговских динамических переменных и не содержащей явно времени, т. е. для такой переменной, которая в шредингеровской картине является постоянным линейным оператором. Из этого уравнения видно, что такая функция  $u_t$  является постоянной, если она коммутирует с  $H_t$  или если  $u$  коммутирует с  $H$ . Тогда мы имеем

$$u_t = u_{t_0} = u,$$

---

\*) Это предположение, как оказалось, является справедливым только для канонических координат и импульсов в декартовой системе координат. В более общих криволинейных координатах оно неверно.

и мы будем тогда называть  $v$ , или  $v$  *интегралом движения*. Необходимо, чтобы оператор  $v$  коммутировал с оператором  $H$  в любой момент времени; обычно это возможно, только если оператор  $H$  сам постоянен и не зависит от времени. В этом случае мы можем подставить в формулу (13) оператор  $H$  вместо оператора  $v$ ; тогда мы получим, что оператор  $H$  является постоянным, и сам оператор  $H$  является интегралом движения. Таким образом, если оператор Гамильтона постоянен в шредингеровской картине, то он постоянен и в гейзенберговской картине.

Для изолированной системы, на которую не действуют внешние силы, всегда существуют некоторые интегралы движения. Одним из таких интегралов является полная энергия, т. е. оператор Гамильтона. Другие интегралы даются теорией сдвигов, рассмотренной в § 25. Физически очевидно, что полная энергия не должна меняться, если все динамические переменные сдвинуть определенным образом; отсюда следует, что уравнение (63) § 25 должно выполняться, если в него подставить  $v_d = v = H$ . Таким образом, оператор  $D$  коммутирует с  $H$  и является интегралом движения. Переходя к бесконечно малым сдвигам, мы видим, что операторы сдвига  $d_x$ ,  $d_y$  и  $d_z$  являются интегралами движения и, следовательно, согласно формуле (69) § 25, интегралом движения является полный импульс системы. Далее, полная энергия не должна меняться, если подвергнуть все динамические переменные некоторому вращению. Как будет показано в § 35, это приводит к тому, что полный момент количества движения является интегралом движения. *Для изолированной системы законы сохранения энергии, импульса и момента количества движения справедливы в гейзенберговской картине квантовой механики так же, как и в классической механике.*

Таким образом, уравнения движения квантовой механики даны в двух формах. Одна из них — шредингеровская форма — более удобна для практических задач, так как она приводит к более простым уравнениям. Неизвестными в шредингеровском волновом уравнении являются числа, которые образуют представитель кет-вектора, в то время как уравнение движения Гейзенберга для динамической переменной, написанное в определенном представлении, содержит в качестве неизвестных числа, образующие представитель динамической переменной. Эти числа образуют уже

двумерную схему, и поэтому их труднее вычислить, чем шредингеровские неизвестные. Гейзенберговская форма уравнений движения важна потому, что она устанавливает непосредственную аналогию с классической механикой, позволяя видеть, каким образом переносятся в квантовую теорию различные особенности классической теории, например такие, как рассмотренные выше законы сохранения.

## § 29. Стационарные состояния

Здесь мы будем рассматривать систему, энергия которой постоянна. Для этого случая справедливы некоторые особенно простые соотношения. Уравнение (6) может быть тогда проинтегрировано \*), и решение его имеет вид

$$T = e^{-iH(t-t_0)/\hbar},$$

при этом использовано начальное условие, что  $T = 1$  при  $t = t_0$ . Подставляя этот результат в формулу (1), получаем вектор

$$|Pt\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |Pt_0\rangle, \quad (16)$$

который является решением шредингеровского уравнения движения (5). Подставляя это решение в формулу (10), получаем

$$v_t = e^{iH(t-t_0)/\hbar} v_0 e^{-iH(t-t_0)/\hbar}. \quad (17)$$

Это есть решение гейзенберговского уравнения движения (11), причем здесь  $H_t = H$ . Таким образом, мы имеем решения уравнений движения в простом виде. Однако эти решения не имеют существенного практического значения вследствие трудности вычислений с оператором  $e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$ , за исключением тех случаев, когда оператор  $H$  имеет особенно простой вид. Для решения практических задач приходится вернуться к решению волнового уравнения Шредингера.

Рассмотрим такое состояние движения системы, что в момент  $t_0$  оно является собственным состоянием энергии. Кет  $|Pt_0\rangle$ , характеризующий систему в этот момент, должен тогда быть собственным кет-вектором оператора  $H$ .

---

\*) Интегрирование можно производить так, как будто  $H$  является обычной алгебраической переменной, а не оператором, потому что в ходе вычислений не появляется величин, которые не коммутируют с  $H$ .

Если обозначить собственное значение  $H$  для этого вектора через  $H'$ , то из уравнения (16) получаем

$$|Pt\rangle = e^{-iH'(t-t_0)/\hbar} |Pt_0\rangle,$$

откуда видно, что кет  $|Pt\rangle$  отличается от  $|Pt_0\rangle$  только фазовым множителем. Таким образом, состояние все время остается собственным состоянием энергии; более того, оно вообще не меняется со временем, так как не меняется со временем направление кет-вектора  $|Pt\rangle$ . Такие состояния называются *стационарными состояниями*. Вероятность какого-либо результата измерения в этом случае не зависит от времени наблюдения. Из нашего предположения, что энергия является наблюдаемой, следует, что совокупность стационарных состояний является полной и что любое состояние может быть представлено в виде линейной комбинации стационарных состояний.

Зависящая от времени волновая функция  $\psi(\xi, t)$ , представляющая состояние с энергией  $H'$ , меняется со временем согласно следующему закону:

$$\psi(\xi, t) = \psi_0(\xi) e^{-iH' t/\hbar}, \quad (18)$$

и волновое уравнение Шредингера (7) упрощается, принимая вид

$$H'\psi_0 = H\psi_0. \quad (19)$$

Это уравнение означает просто, что состояние, характеризуемое функцией  $\psi_0$ , является собственным состоянием энергии  $H$ . Мы назовем функцию  $\psi_0$ , удовлетворяющую уравнению (19), *собственной функцией  $H$*  с собственным значением  $H'$ .

В гейзенберговской картине стационарные состояния характеризуются постоянными собственными векторами энергии. Мы можем построить представление, в котором все базисные векторы будут собственными векторами энергии и, таким образом, характеризуют стационарные состояния в гейзенберговской картине. Назовем такое представление *представлением Гейзенберга*. Первоначальная форма квантовой механики, открытая Гейзенбергом в 1925 г., была основана на представлении такого рода. Энергия в этом представлении диагональна. Любая другая диагональная динамическая переменная будет тогда коммутировать с энергией и будет, следовательно, интегралом движения. Задача о построении представления Гейзенберга сводится, таким

образом, к задаче о нахождении полного набора коммутирующих наблюдаемых, каждая из которых является интегралом движения и, следовательно, диагональна в этом представлении. Согласно теореме 2 § 19 энергия должна быть функцией этих наблюдаемых. Иногда оказывается удобным принять за одну из таких наблюдаемых саму энергию.

Пусть  $\alpha$  означает полный набор коммутирующих наблюдаемых в представлении Гейзенберга, тогда базисные бра- и кет-векторы можно записать в виде  $\langle \alpha' |$ ,  $| \alpha'' \rangle$ . Энергия является функцией этих наблюдаемых, т. е.  $H \cong H(\alpha)$ . Из формулы (17) получаем

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | v_t | \alpha'' \rangle &= \langle \alpha' | e^{iH(t-t_0)/\hbar} v e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \alpha'' \rangle = \\ &= e^{i(H' - H'')(t-t_0)/\hbar} \langle \alpha' | v | \alpha'' \rangle, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $H' = H(\alpha')$  и  $H'' = H(\alpha'')$ . Множитель  $\langle \alpha' | v | \alpha'' \rangle$  в правой части формулы не зависит от времени, поскольку он является элементом матрицы — представителя постоянного линейного оператора  $v$ . Из формулы (20) видно, как меняется со временем гейзенберговский матричный элемент любой гейзенберговской динамической переменной; именно такая зависимость от времени приводит, как легко убедиться, к тому, что оператор  $v_t$  удовлетворяет уравнению движения (11). Зависимость от времени в формуле (20) является чисто периодической с частотой

$$|H' - H''|/2\pi\hbar = |H' - H''|/\hbar, \quad (21)$$

зависящей только от разности энергий тех двух стационарных состояний, к которым относится данный матричный элемент. Этот результат тесно связан с комбинационным принципом в спектроскопии и с правилом частот Бора, согласно которому величина (21) есть частота электромагнитного излучения, которое испускается или поглощается, когда система совершает переход между состояниями  $\alpha'$  и  $\alpha''$  под влиянием излучения; собственные значения оператора  $H$  являются при этом боровскими уровнями энергии. Эти вопросы будут рассматриваться в § 45.

### § 30. Свободная частица

Наиболее фундаментальным и простым приложением квантовой механики является ее приложение к системе, состоящей только из одной свободной частицы, т. е. из частицы,



на которую не действуют силы. Для ее рассмотрения мы воспользуемся в качестве динамических переменных тремя декартовыми координатами  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и сопряженными с ними импульсами  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ . Гамильтонианом будет в этом случае кинетическая энергия частицы, т. е., согласно механике Ньютона,

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \quad (22)$$

где  $m$  — масса частицы. Эта формула справедлива, если только скорость частицы мала по сравнению со скоростью света  $c$ . Для быстро движущихся частиц, с которыми часто приходится иметь дело в атомной теории, формулу (22) следует заменить релятивистской формулой

$$H = c (m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}. \quad (23)$$

Для малых значений  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$  формула (23) переходит в (22) с точностью до постоянной  $mc^2$ , которая соответствует энергии покоя частицы в теории относительности и не влияет на уравнения движения. Формулы (22) и (23) можно непосредственно перенести в квантовую теорию. Квадратный корень в формуле (23) следует тогда понимать как положительный квадратный корень, определение которого дано в конце § 11. Постоянная  $mc^2$ , на которую отличается формула (23) от (22) при малых значениях  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$ , по-прежнему не повлияет на физические следствия, так как гамильтониан в квантовой теории, согласно данному в § 27 определению, определен лишь с точностью до произвольной вещественной аддитивной постоянной.

Мы рассмотрим здесь более точную формулу (23). Прежде всего решим уравнения движения Гейзенберга. Согласно квантовым условиям (9) § 21,  $p_x$  коммутирует с  $p_y$  и  $p_z$ , отсюда, согласно теореме 1 § 19, обобщенной на случай нескольких коммутирующих наблюдаемых,  $p_x$  коммутирует с любой функцией  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$ , а следовательно, и с  $H$ . Это означает, что  $p_x$  является интегралом движения. Аналогично  $p_y$  и  $p_z$  являются интегралами движения. Эти результаты совпадают с соответствующими результатами классической теории. Далее, уравнение движения для координаты, например для  $x_t$ , имеет, согласно формуле (11), вид

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{x}_t &= i\hbar \frac{dx_t}{dt} = \\ &= x_t c (m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} - c (m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} x_t. \end{aligned}$$

вводя дополнительные значки, например  $A$ , и будем обозначать кет, характеризующий это состояние,  $|At\rangle$ . Требование, чтобы состояние в один момент времени определяло состояние в другой момент времени, означает, что кет  $|At_0\rangle$  определяет с точностью до численного множителя кет  $|At\rangle$ . Принцип суперпозиции справедлив для этих состояний движения в течение всего времени, пока система не испытывает возмущения. Он гласит, что если в момент  $t_0$  имеет место суперпозиционная связь между некоторыми состояниями, которая приводит к линейному уравнению между соответствующими кет-векторами, например к уравнению

$$|Rt_0\rangle = c_1 |At_0\rangle + c_2 |Bt_0\rangle,$$

то эта же связь должна иметь место между состояниями движения в течение всего времени, пока система не испытывает возмущений. Поэтому то же самое линейное соотношение должно быть справедливо для кет-векторов, характеризующих эти состояния в любой момент  $t$  (из промежутка времени, в течение которого система не испытывает возмущения), т. е. в данном случае должно выполняться уравнение

$$|Rt\rangle = c_1 |At\rangle + c_2 |Bt\rangle,$$

если только выбрать должным образом произвольные численные множители при этих векторах. Отсюда следует, что кет-векторы  $|Pt\rangle$  зависят линейным образом от кет-векторов  $|Pt_0\rangle$  и каждый кет  $|Pt\rangle$  является результатом действия некоторого линейного оператора на кет  $|Pt_0\rangle$ . В наших обозначениях получаем

$$|Pt\rangle = T |Pt_0\rangle, \quad (1)$$

где  $T$  — линейный оператор, не зависящий от  $P$  и зависящий только от  $t$  (и от  $t_0$ ).

Предположим теперь, что все  $|Pt\rangle$  имеют ту же длину, что и  $|Pt_0\rangle$ . Не всегда возможно выбрать произвольные численные множители, на которые можно умножать векторы  $|Pt\rangle$  так, чтобы это предположение выполнялось. Таким образом, это новое предположение является физическим, а не является просто вопросом обозначений. Оно представляет собой некоторое уточнение принципа суперпозиции. Тогда в векторе  $|Pt\rangle$  остается произвольным только фазовый множитель, который не должен зависеть от  $|Pt\rangle$  для того, чтобы

Функция (29) переменных  $x, y, z$  и  $t$  описывает плоскую волну в пространстве-времени. Из этого примера видна целесообразность терминов «волновая функция» и «волновое уравнение». Частота волны  $\nu$  равна

$$\nu = H'/h, \quad (30)$$

длина волны  $\lambda$  равна

$$\lambda = h/(p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2)^{1/2} = h/P', \quad (31)$$

где  $P'$  — длина вектора  $(p_x', p_y', p_z')$ , направление движения определяется вектором  $(p_x', p_y', p_z')$ , а фазовая скорость волны — величиной

$$\lambda\nu = H'/P' = c^2/v', \quad (32)$$

где  $v'$  — скорость частицы, обладающей импульсом  $(p_x', p_y', p_z')$ , вычисленная по формуле (26). Уравнения (30)—(32), как легко видеть, справедливы во всех лоренцевых системах отсчета, поскольку правая часть формулы (29) является релятивистски инвариантной, причем  $p_x', p_y', p_z'$  и  $H'$  являются компонентами четырехмерного вектора. Эти свойства релятивистской инвариантности привели де Бройля еще до открытия квантовой механики к постулату, что с движением любой частицы связаны волны вида (29). Поэтому эти волны известны под названием *волн де Бройля*.

В предельном случае, когда масса  $m$  стремится к нулю, классическая скорость  $v$  частицы становится равной  $c$ , и следовательно, согласно формуле (32), волновая скорость также становится равной  $c$ . Волна будет тогда подобна световой волне, связанной с фотоном, с той разницей, что в ней отсутствует указание на направление поляризации и что она содержит комплексную экспоненту вместо синуса и косинуса. Формулы (30) и (31) по-прежнему справедливы, и они связывают частоту световой волны с энергией, а длину волны — с импульсом фотона.

Для состояния, которое характеризуется функцией (29), вероятность найти частицу, при измерении ее положения, в некотором малом объеме, не зависит от положения этого объема. Это является иллюстрацией принципа неопределенности Гейзенберга: для состояния, в котором импульс точно задан, координата оказывается совершенно неопределенной. Такое состояние является, конечно, предельным случаем, который никогда не осуществляется. Состояния,

с которыми обычно приходится иметь дело, характеризуются волновыми пакетами, которые, согласно рассуждениям § 24, получаются в результате наложения ряда волн типа (29) со слегка отличающимися значениями параметров ( $p'_x$ ,  $p'_y$ ,  $p'_z$ ). Обычная, известная из гидродинамики формула для скорости такого волнового пакета, т. е. для *групповой скорости* волн, имеет вид

$$\frac{dv}{d(1/\lambda)}, \quad (33)$$

откуда, согласно формулам (30) и (31), получаем

$$\frac{dH'}{dP'} = c \frac{d}{dP'} (m^2 c^2 + P'^2)^{1/2} = \frac{c^2 P'}{H'} = v'. \quad (34)$$

Это и есть как раз скорость частицы. Волновой пакет движется в том же направлении и с той же скоростью, что и частица в классической механике.

### § 31. Движение волнового пакета

Только что полученный результат является частным случаем общего принципа. Для любой динамической системы, обладающей классическим аналогом, состояние, для которого приближенно справедливо классическое описание, характеризуется в квантовой механике волновым пакетом, причем все координаты и импульсы имеют почти определенные значения с разбросом, ограниченным снизу принципом неопределенности Гейзенберга. Но изменение волнового пакета со временем определяется волновым уравнением Шредингера. Следовательно, для того чтобы классическое описание оставалось справедливым и с течением времени, волновой пакет должен оставаться волновым пакетом и должен двигаться по законам классической механики. Убедимся, что это действительно так.

Рассмотрим динамическую систему, обладающую классическим аналогом. Обозначим ее гамильтониан через  $H(q_r, p_r)$  ( $r = 1, 2, \dots, n$ ). Соответствующая классическая динамическая система будет иметь гамильтониан  $H_c(q_r, p_r)$ , который получится, если подставить обычные алгебраические переменные вместо  $q_r$  и  $p_r$  в функцию  $H(q_r, p_r)$  и устремить постоянную  $\hbar$  к нулю, если она содержится в  $H(q_r, p_r)$ . Классический гамильтониан является, конечно, веществен-

ной функцией своих переменных. Обычно он представляет квадратичную функцию импульсов  $p_r$ , но это не всегда так: релятивистская теория свободной частицы является примером того, когда он имеет другой вид.

Предположим, что зависящая от времени волновая функция в представлении Шредингера имеет вид

$$\psi(qt) = Ae^{iS/\hbar}, \quad (35)$$

где  $A$  и  $S$  — вещественные функции переменных  $q$  и времени  $t$ , которые не очень быстро изменяются при изменении своих аргументов. Волновая функция имеет тогда вид волны, причем  $A$  и  $S$  определяют соответственно амплитуду и фазу. Волновое уравнение Шредингера (7) принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} Ae^{iS/\hbar} = H(q_r, p_r) Ae^{iS/\hbar}$$

или

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right\} = e^{-iS/\hbar} H(q_r, p_r) Ae^{iS/\hbar}. \quad (36)$$

Далее,  $e^{-iS/\hbar}$  есть, очевидно, унитарный линейный оператор, и его можно взять в качестве  $U$  в уравнении (70) § 26, что дает нам унитарное преобразование. Все координаты  $q_r$  остаются при этом преобразовании неизменными; импульсы  $p_r$  переходят в

$$e^{-iS/\hbar} p_r e^{iS/\hbar} = p_r + \partial S / \partial q_r$$

согласно формуле (31) § 22, а  $H$  принимает вид

$$e^{-iS/\hbar} H(q_r, p_r) e^{iS/\hbar} = H(q_r, p_r + \partial S / \partial q_r),$$

поскольку все алгебраические соотношения после преобразования сохраняются. Таким образом, уравнение (36) запишется в виде

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right\} = H\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right) A. \quad (37)$$

Допустим теперь, что постоянную  $\hbar$  можно считать малой, и пренебрежем всеми членами в формуле (37), содержащими  $\hbar$ . Это означает, в частности, что следует пренебречь входящими в  $H$  в формуле (37) величинами  $p_r$ , так как каждая величина  $p_r$  эквивалентна оператору  $-i\hbar \partial / \partial q_r$ , который действует на функцию от координат  $q$ , находя-

щуюся справа от него. После такого пренебрежения получаем

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c \left( q_r, \frac{\partial S}{\partial q_r} \right). \quad (38)$$

Это — дифференциальное уравнение, которому должна удовлетворять фазовая функция  $S$ . Вид его определяется классической функцией Гамильтона  $H_c$ , и оно известно в классической механике под названием *уравнения Гамильтона — Якоби*. Оно допускает вещественные решения для  $S$ , откуда видно, что предположение о том, что волна имеет вид (35), не приводит к противоречиям.

Чтобы получить уравнение для  $A$ , следует удержать в уравнении (37) члены, линейные относительно  $\hbar$ , и посмотреть, что дадут эти члены. Прямое вычисление этих членов для функции  $H$  общего вида довольно затруднительно; легче получить нужный нам результат, умножив предварительно обе части уравнения (37) на бра-вектор  $\langle Af$ , где  $f$  есть произвольная вещественная функция от  $q$ . Имеем тогда

$$\langle Af \left\{ i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right\} \rangle = \langle Af H \left( q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r} \right) A \rangle.$$

Комплексно-сопряженное уравнение имеет вид

$$\langle Af \left\{ -i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right\} \rangle = \langle AH \left( q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r} \right) fA \rangle.$$

Вычитая эти уравнения и сокращая на  $i\hbar$ , получаем

$$2 \langle Af \frac{\partial A}{\partial t} \rangle = \langle A \left[ f, H \left( q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r} \right) \right] A \rangle. \quad (39)$$

Вычислим далее СП:

$$\left[ f, H \left( q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r} \right) \right].$$

Наше предположение, что постоянную  $\hbar$  можно считать малой, позволяет разложить функцию  $H(q_r, p_r + \partial S/\partial q_r)$  в ряд по степеням  $p$ . Члены, не зависящие от  $p$ , не вносят никакого вклада в СП. Члены, линейно зависящие от  $p$ , вносят вклад в СП, который легко вычислить, используя классическую формулу (1) § 21 (эта формула остается справедливой также и в квантовой теории, если  $u$  не зави-

сит от импульсов  $p$ , а  $v$  линейно зависит от  $p$ ). Величина этого вклада равна

$$\sum_s \frac{\partial f}{\partial q_s} \left[ \frac{\partial H(q_r, p_r)}{\partial p_s} \right]_{p_r = \partial S / \partial q_r},$$

причем введенные обозначения имеют тот смысл, что в функции [ ] от координат  $q$  и импульсов  $p$  следует подставить вместо каждого из  $p_r$  величину  $\partial S / \partial q_r$ ; таким образом, мы получаем функцию одних только координат. Дальнейшие члены разложения по  $p$  дают вклад в СП, который исчезает, когда  $\hbar \rightarrow 0$ . Итак, если в формуле (39) пренебречь членами, содержащими  $\hbar$  (что эквивалентно пренебрежению членами, содержащими  $\hbar^2$  в формуле (37)), то мы получаем

$$\langle f \frac{\partial A^2}{\partial t} \rangle = \langle A^2 \sum_s \frac{\partial f}{\partial q_s} \left[ \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s} \right]_{p_r = \partial S / \partial q_r} \rangle. \quad (40)$$

Далее, если  $a(q)$  и  $b(q)$  — любые две функции координат  $q$ , то по формуле (64) § 20 имеем

$$\langle a(q) b(q) \rangle = \int a(q') dq' b(q')$$

и, таким образом, будет

$$\langle a(q) \frac{\partial b(q)}{\partial q_r} \rangle = - \langle \frac{\partial a(q)}{\partial q_r} b(q) \rangle, \quad (41)$$

если только  $a(q)$  и  $b(q)$  удовлетворяют должным граничным условиям (см. §§ 22 и 23). Отсюда следует, что формулу (40) можно записать в виде

$$\langle f \frac{\partial A^2}{\partial t} \rangle = - \langle f \sum_s \frac{\partial}{\partial q_s} \left\{ A^2 \left[ \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s} \right]_{p_r = \partial S / \partial q_r} \right\} \rangle.$$

Поскольку эта формула справедлива для произвольной вещественной функции  $f$ , мы должны иметь

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} = - \sum_s \frac{\partial}{\partial q_s} \left\{ A^2 \left[ \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s} \right]_{p_r = \partial S / \partial q_r} \right\}. \quad (42)$$

Это и есть уравнение для амплитуды волновой функции. Для того чтобы понять его смысл, предположим, что имеется жидкость, движущаяся в пространстве переменных  $q$ ,

причем плотность жидкости в каждой точке равна  $A^2$ , а скорость равна

$$\frac{dq_s}{dt} = \left[ \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s} \right]_{p_r = \partial S / \partial q_r}. \quad (43)$$

Уравнение (42) как раз совпадет тогда с уравнением неразрывности для такой жидкости. Движение жидкости определяется функцией  $S$ , удовлетворяющей уравнению (38), причем каждому решению этого уравнения соответствует одно возможное движение.

Рассмотрим при заданном  $S$  решение уравнения (42), для которого плотность  $A^2$  в определенный момент времени исчезает вне некоторой малой области. Мы можем предположить, что область движется вместе с жидкостью и ее скорость в каждой точке определяется уравнением (43), и тогда из уравнения неразрывности (43) будет следовать, что плотность будет всегда исчезать вне этой области. Область нельзя выбирать слишком малой — это следует из приближения, которое мы сделали, пренебрегая постоянной  $\hbar$  в формуле (39). Это приближение справедливо, если только выполняется условие

$$\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} A \ll \frac{\partial S}{\partial q_r} A,$$

или иначе

$$\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial q_r} \ll \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial q_r}.$$

Это условие означает, что заметное относительное изменение амплитуды  $A$  может происходить лишь на таком интервале изменения координат  $q$ , на котором изменение функции  $S$  во много раз превосходит постоянную  $\hbar$ , т. е. в таком интервале, который включает в себя много длин волн волновой функции (35). Наше решение является, таким образом, волновым пакетом того типа, который обсуждался в § 24, причем оно остается пакетом в течение всего времени.

Итак, мы получили волновую функцию, характеризующую состояние движения, для которого координаты и импульсы имеют приближенно определенные численные значения во все моменты времени. Такое состояние движения в квантовой теории соответствует тем состояниям, с которыми имеет дело классическая теория. Движение нашего волнового пакета определяется уравнениями (38) и (43).



Разумея под импульсами  $p_s$  величины  $\partial S/\partial q_s$ , получаем из этих уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dp_s}{dt} &= \frac{d}{dt} \frac{\partial S}{\partial q_s} = \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q_s} + \sum_u \frac{\partial^2 S}{\partial q_u \partial q_s} \frac{dq_u}{dt} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial q_s} H_c \left( q_r, \frac{\partial S}{\partial q_r} \right) + \sum_u \frac{\partial^2 S}{\partial q_u \partial q_s} \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_u} = -\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial q_s}, \end{aligned} \quad (44)$$

причем в последней строчке при частном дифференцировании импульсы  $p$  и координаты  $q$  считаются независимыми переменными. Уравнения (43) и (44) являются как раз классическими уравнениями движения в форме Гамильтона, и из них видно, что волновой пакет движется согласно законам классической механики. Таким образом, мы показали, как можно вывести классические уравнения движения из квантовой механики, рассматривая их как предельный случай квантовых уравнений движения.

Решая волновое уравнение более точно, можно показать, что точность, с которой координаты и импульсы имеют одновременно определенные численные значения, не может оставаться постоянно предельно высокой, допускаемой принципом неопределенности Гейзенберга, т. е. уравнением (56) § 29. Если первоначально точность и была предельно высокой, то затем она становится меньше и волновой пакет расплывается \*).

### § 32. Принцип действия \*\*)

Из уравнения (10) видно, что гейзенберговские динамические переменные  $v_i$  в момент  $t$  связаны унитарным преобразованием с этими же переменными  $v_{i_0}$  или  $v$  в момент  $t_0$ . Гейзенберговские переменные в момент  $t + \delta t$  связаны с переменными в момент  $t$  бесконечно малым унитарным преобразованием, что следует из уравнений движения (11) или (13); из них получаются связывающие  $v_{t+\delta t}$  и  $v_t$  уравнения типа (79) или (80) § 26, в которых нужно подставить  $H_t$  вместо  $F$  и  $\delta t/\hbar$  вместо  $\varepsilon$ . Изменение со временем динамиче-

\*) См. Kennard, Z. f. Physik, 1927, Bd. 44, S. 344; Darwin — Proc. Roy. Soc. A, 1927, v. 117, p. 258.

\*\*) Читатель, не знакомый достаточно детально с аналитической динамикой, может пропустить этот параграф.

ских переменных Гейзенберга можно, таким образом, рассматривать как непрерывно разворачивающееся унитарное преобразование. В классической механике значения динамических переменных в момент  $t + \delta t$  связаны с их значением в момент  $t$  бесконечно малым касательным преобразованием, и все движение системы можно также рассматривать как непрерывно разворачивающееся касательное преобразование. Мы имеем здесь математическую основу аналогии между классическими и квантовыми уравнениями движения, и можем развить ее далее, получив квантовые аналоги всех основных положений классической динамики.

Пусть имеется представление, в котором диагонален полный набор коммутирующих наблюдаемых  $\xi$ , так что базисные бра-векторы будут иметь вид  $\langle \xi' |$ . Можно ввести другое представление, базисными бра-векторами которого будут

$$\langle \xi'^* | = \langle \xi' | T. \quad (45)$$

Новые базисные бра-векторы зависят от времени  $t$  и образуют как бы движущееся представление, подобное движущейся системе осей в обычном векторном пространстве. Сравнивая формулу (45) с формулой, сопряженной с (8), мы видим, что новые базисные векторы получаются из старых путем преобразования от шредингеровской картины движения к гейзенберговской картине; поэтому они должны быть так же связаны с динамическими переменными Гейзенберга  $v_t$ , как исходные базисные векторы связаны с динамическими переменными Шредингера  $v$ . В частности, каждый бра  $\langle \xi'^* |$  должен быть собственным вектором переменной  $\xi$ , с собственным значением  $\xi'$ . Поэтому эти бра можно обозначить через  $\langle \xi'_t |$ , подразумевая, что числа  $\xi'_t$ , являющиеся собственными значениями переменных  $\xi_t$ , совпадают с собственными значениями  $\xi'$  переменных  $\xi$ . Из формулы (45) получаем

$$\langle \xi'_t | \xi'' \rangle = \langle \xi' | T | \xi'' \rangle, \quad (46)$$

откуда видно, что функция преобразования является просто представителем оператора  $T$  в исходном представлении.

Дифференцируя формулу (45) по  $t$  и используя (6) и (12), имеем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \xi'_t | = i\hbar \langle \xi' | \frac{dT}{dt} = \langle \xi' | HT = \langle \xi'_t | H_t.$$

Умножая справа на произвольный кет  $|a\rangle$ , не зависящий от  $t$ , получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \xi'_i | a \rangle = \langle \xi'_i | H_t | a \rangle = \int \langle \xi'_i | H_t | \xi''_i \rangle d\xi''_i \langle \xi''_i | a \rangle, \quad (47)$$

если для определенности рассматривать случай сплошного спектра собственных значений наблюдаемых  $\xi$ . С другой стороны, уравнение (5), записанное с помощью представителей, имеет вид

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \xi' | Pt \rangle = \int \langle \xi' | H | \xi'' \rangle d\xi'' \langle \xi'' | Pt \rangle. \quad (48)$$

Поскольку  $\langle \xi'_i | H_t | \xi''_i \rangle$  и  $\langle \xi'_i | H | \xi''_i \rangle$  — одинаковые функции своих переменных  $\xi'_i$ ,  $\xi''_i$  и  $\xi'_i$ ,  $\xi''_i$ , то уравнения (47) и (48) в точности совпадают, если только заменить в уравнении (47) переменные  $\xi'_i$ ,  $\xi''_i$  на  $\xi'_i$ ,  $\xi''_i$ , а функцию  $\langle \xi'_i | a \rangle$  на функцию  $\langle \xi' | Pt \rangle$ . Мы можем, таким образом, рассматривать уравнение (47) как такой вид волнового уравнения Шредингера, в котором роль волновой функции играет функция  $\langle \xi'_i | a \rangle$  от переменных  $\xi'_i$ . Итак, *волновое уравнение Шредингера можно рассматривать с новой точки зрения как условие, налагаемое на представитель не зависящего от времени кет-вектора, характеризующего состояние в гейзенберговской картине; это условие налагается на вектор в том «подвижном» представлении, в котором переменные Гейзенберга  $\xi_i$  диагональны*. В функции  $\langle \xi'_i | a \rangle$  зависимость от времени символизируется левым множителем  $\langle \xi'_i |$ , в отличие от функции  $\langle \xi' | Pt \rangle$ , изменение которой со временем символизируется правым множителем  $| Pt \rangle$ .

Если положить  $|a\rangle = |\xi''\rangle$  в формуле (47), то получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \xi'_i | \xi'' \rangle = \int \langle \xi'_i | H_t | \xi'''_i \rangle d\xi'''_i \langle \xi'''_i | \xi'' \rangle, \quad (49)$$

откуда видно, что функция преобразования  $\langle \xi'_i | \xi'' \rangle$  удовлетворяет волновому уравнению Шредингера. Далее,  $\xi_{i_0} = \xi$  и, следовательно,

$$\langle \xi'_{i_0} | \xi'' \rangle = \delta(\xi'_{i_0} - \xi''), \quad (50)$$

причем под дельта-функцией здесь подразумевается произведение множителей, по одному на каждую из переменных  $\xi$ , подобное тому, которое имелось в правой части уравнения (34) § 16 для переменных  $\xi_{v+1}, \dots, \xi_n$ . Таким образом, функ-

ция преобразования является таким решением волнового уравнения Шредингера, для которого переменные  $\xi$  имеют наверняка значения  $\xi''$  в момент  $t_0$ . Квадрат модуля этой функции  $|\langle \xi' | \xi'' \rangle|^2$  равен относительной вероятности того, что переменные  $\xi$  имеют значения  $\xi'$  при некотором  $t > t_0$ , если при  $t = t_0$  эти переменные наверняка имели значения  $\xi''$ . Функцию  $\langle \xi' | \xi'' \rangle$  можно записать в виде  $\langle \xi' | \xi''_0 \rangle$  и считать, что она зависит не только от  $t$ , но и от  $t_0$ . Чтобы получить эту зависимость от  $t_0$ , рассмотрим уравнение, сопряженное уравнению (49), поменяем местами  $t$  и  $t_0$ , а также значки  $'$  и  $''$ . Тогда получаем

$$-i\hbar \frac{d}{dt_0} \langle \xi' | \xi''_0 \rangle = \int \langle \xi' | \xi''_0 \rangle d\xi''_0 \langle \xi''_0 | H_{t_0} | \xi''_0 \rangle. \quad (51)$$

Проведенное рассмотрение функции преобразования  $\langle \xi' | \xi'' \rangle$  справедливо, если переменные  $\xi$  образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых. Уравнения написаны для случая, когда все  $\xi$  имеют сплошной спектр собственных значений, но они остаются справедливыми, если любые из переменных  $\xi$  имеют дискретный спектр собственных значений, если только произвести необходимые формальные изменения в этих уравнениях. Рассмотрим теперь динамическую систему, которая имеет классический аналог, и пусть наблюдаемыми  $\xi$  будут координаты  $q$ . Положим

$$\langle q' | q'' \rangle = e^{iS/\hbar}, \quad (52)$$

определив таким образом функцию  $S$  от переменных  $q'_t, q''$ . Эта функция зависит также явно от  $t$ . Функция (52) является решением волнового уравнения Шредингера, и если постоянную  $\hbar$  можно считать малой, то с ней можно действовать так же, как с функцией (35). В формуле (52)  $S$  отличается от  $S$  в (35) тем, что в формуле (52) нет  $A$ , и поэтому  $S$  в ней является комплексной функцией, но вещественная часть этой функции равна  $S$  в (35), а ее мнимая часть имеет порядок величины  $\hbar$ . Таким образом, в пределе при  $\hbar \rightarrow 0$  функция  $S$  в (52) равна  $S$  в (35) и поэтому, согласно формуле (38) должна удовлетворять уравнению

$$-\partial S / \partial t = H_c(q'_{rt}, p'_{rt}), \quad (53)$$

где

$$p'_{rt} = \partial S / \partial q'_{rt}, \quad (54)$$

а  $H_c$  есть гамильтониан классического аналога нашей квантовой динамической системы. Но функция (52) является также решением уравнения (51), если подставить в него  $q$  вместо  $\xi$ , так как уравнение (51) является комплексно-сопряженным волновому уравнению Шредингера с переменными  $q''$  или  $q''_0$ . Это приводит к тому, что функция  $S$  удовлетворяет также уравнению \*)

$$\partial S / \partial t_0 = H_c(q'', p''), \quad (55)$$

где

$$p''_r = - \partial S / \partial q''_r. \quad (56)$$

Решением уравнений Гамильтона — Якоби (53) и (55) является в классической механике функция действия для промежутка времени от  $t_0$  до  $t$ , т. е. интеграл по времени от функции Лагранжа  $L$ ,

$$S = \int_{t_0}^t L(t') dt'. \quad (57)$$

Таким образом, функция  $S$ , определяемая формулой (52), есть квантовый аналог классической функции действия \*\*), и они равны между собой в пределе при  $\hbar \rightarrow 0$ . Чтобы получить квантовый аналог классической функции Лагранжа, перейдем к случаю бесконечно малого промежутка времени, положив  $t = t_0 + \delta t$ ; тогда величина  $\langle q''_{t_0+\delta t} | q''_{t_0} \rangle$  будет аналогом величины  $e^{iL(t_0)\delta t/\hbar}$ . Ради аналогии будем считать  $L(t_0)$  функцией координат  $q'$  в момент  $t_0 + \delta t$  и координат  $q''$  в момент  $t_0$ , а не функцией координат и скоростей в момент  $t_0$ , как это делается обычно.

Принцип наименьшего действия в классической механике гласит, что функция действия (57) остается стационарной при малых вариациях траектории системы, которые не смещают конечных точек, т. е. при малых вариациях координат  $q$  во все промежуточные моменты времени между  $t_0$  и  $t$ , причем  $q_{t_0}$  и  $q_t$  остаются фиксированными. Посмотрим, что соответствует этому принципу в квантовой теории. Пусть

$$\exp \left\{ i \int_{t_a}^{t_b} L(t) dt / \hbar \right\} = \exp \{ i S(t_b, t_a) / \hbar \} = B(t_b, t_a), \quad (58)$$

\*) Подробное сравнение функций преобразования с классической теорией см. В а п В е с к, — Proc. Nat. Acad., 1928, v. 14, p. 178.

\*\*) Функция (57) должна быть выражена через начальные и конечные значения координат ( $q''_r$  и  $q'_r$ ). (Прим. В. А. Фока.)

так что величина  $B(t_b, t_a)$  есть классический аналог квантовой величины  $\langle q'_{t_b} | q'_{t_a} \rangle$ . (Мы считаем здесь, что  $q'_{t_a}$  и  $q'_{t_b}$  означают разные собственные значения переменных  $q_{t_a}$  и  $q_{t_b}$  для того, чтобы не вводить в формулы большого числа штрихов.) Предположим далее, что промежутки времени  $t_0 \rightarrow t$  разделен на большое число малых промежутков  $t_0 \rightarrow t_1, t_1 \rightarrow t_2, \dots, t_{m-1} \rightarrow t_m, t_m \rightarrow t$ , путем введения промежуточных значений времени  $t_1, t_2, \dots, t_m$ . Тогда получаем

$$B(t, t_0) = B(t, t_m) B(t_m, t_{m-1}) \dots B(t_2, t_1) B(t_1, t_0). \quad (59)$$

Соответствующее квантовое уравнение, которое следует из свойства (35) § 16 базисных векторов, имеет вид

$$\langle q'_i | q'_0 \rangle = \int \int \dots \int \langle q'_i | q'_m \rangle dq'_m \langle q'_m | q'_{m-1} \rangle dq'_{m-1} \dots \dots \langle q'_2 | q'_1 \rangle dq'_1 \langle q'_1 | q'_0 \rangle, \quad (60)$$

где для краткости вместо  $q'_{t_k}$  всюду написано  $q'_k$ . На первый взгляд между формулами (59) и (60) нет сколько-нибудь близкого соответствия. Однако смысл уравнения (59) следует проанализировать несколько более тщательно. Каждый из множителей  $B$  нужно рассматривать как функцию значений координат  $q$  на концах того временного интервала, к которому этот множитель относится. Тогда правая часть уравнения (59) будет зависеть не только от  $q_i$  и  $q_0$ , но также и от всех промежуточных значений  $q$ . Уравнение (59) справедливо только в том случае, если вместо промежуточных координат  $q$  в правой части подставить их значения для истинной траектории, малые вариации которых оставляют функцию  $S$ , а следовательно, согласно (58), и величину  $B(t, t_0)$  стационарными. Процесс подстановки этих промежуточных значений координат  $q$  и соответствует интегрированию по всем промежуточным  $q$  в формуле (60)\*). Квантовый аналог принципа действия содержится, таким образом, в законе композиции (60), а классическое требование, согласно которому промежуточные значения  $q$  должны быть таковы, чтобы функция  $S$  была по отношению к ним ста-

---

\*) Формула (60), предложенная Дираком в 1935 г., явилась основой для интеграла по путям, впоследствии введенного Р. Фейнманом. (Прим. ред.)

ционарной, соответствует в квантовой механике тому условию, что из всех значений промежуточных координат существенны лишь те, которые вносят заметный вклад в интеграл в формуле (60).

Выясним, каким образом формула (59) может быть предельным случаем формулы (60) при малых  $\hbar$ . Мы должны предположить, что подынтегральное выражение в формуле (60) имеет вид  $e^{iF/\hbar}$ , где  $F$  — функция от  $q'_0, q'_1, q'_2, \dots, q'_m, q'_i$ , которая остается непрерывной, когда  $\hbar$  стремится к нулю, так что подынтегральное выражение является быстро осциллирующей функцией, когда постоянная  $\hbar$  мала. Интеграл от такой быстро осциллирующей функции, взятый по любому участку, будет весьма мал, за исключением того участка, в котором сравнительно большие вариации координат  $q'_k$  приводят лишь к весьма малым вариациям  $F$ . Таким участком будет окрестность той точки, в которой функция  $F$  стационарна относительно малых вариаций  $q'_k$ . Таким образом, значение интеграла в формуле (60) определяется в основном значением подынтегральной функции в той точке, в которой эта функция стационарна относительно малых вариаций промежуточных значений координат  $q$ , и, таким образом, формула (60) переходит в формулу (59).

Уравнения (54) и (56) выражают тот факт, что переменные  $q'_i, p'_i$  связаны с переменными  $q'', p''$  касательным преобразованием и являются стандартной формой записи касательного преобразования. Аналогичная форма записи уравнений унитарного преобразования возможна и в квантовой механике. Из формулы (52), с помощью формулы (45) § 22, имеем

$$\langle q'_i | p_{ri} | q'' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_{ri}} \langle q'_i | q'' \rangle = \frac{\partial S(q'_i, q'')}{\partial q'_{ri}} \langle q'_i | q'' \rangle. \quad (61)$$

Аналогично, используя уравнение (46) § 22, получаем

$$\langle q'_i | p_r | q'' \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q''_r} \langle q'_i | q'' \rangle = -\frac{\partial S(q'_i, q'')}{\partial q''_r} \langle q'_i | q'' \rangle. \quad (62)$$

Из общего определения функции коммутирующих наблюдаемых \*) имеем далее

$$\langle q'_i | f(q_i) g(q) | q'' \rangle = f(q'_i) g(q'') \langle q'_i | q'' \rangle, \quad (63)$$

\*) Автор имеет в виду, что различные  $q'_i$  коммутируют между собой, а также различные  $q$  — между собой, (Прим. В. А. Фока),

где  $f(q_t)$  и  $g(q)$  — соответственно функции переменных  $q_t$  и  $q$ . Пусть  $G(q_t, q)$  — произвольная функция переменных  $q_t$  и  $q$ , которая может быть разложена в сумму или интеграл по членам вида  $f(q_t)g(q)$  так, что все переменные  $q_t$  расположены слева от переменных  $q$ . Назовем такую функцию *упорядоченной*. Применяя формулу (63) к каждому из членов функции  $G$  и производя суммирование или интегрирование, получаем  $\langle q'_t | G(q_t, q) | q'' \rangle = G(q'_t, q'') \langle q'_t | q'' \rangle$ . Предположим далее, что каждая из переменных  $p_{rt}$  и  $p_r$  может быть представлена как упорядоченная функция координат  $q_t$  и  $q$ ; обозначим эти функции через  $p_{rt}(q_t, q)$  и  $p_r(q_t, q)$ . Подставляя эти функции вместо  $G$ , получаем

$$\begin{aligned}\langle q'_t | p_{rt} | q'' \rangle &= p_{rt}(q'_t, q'') \langle q'_t | q'' \rangle, \\ \langle q'_t | p_r | q'' \rangle &= p_r(q'_t, q'') \langle q'_t | q'' \rangle.\end{aligned}$$

Сравнивая эти уравнения соответственно с уравнениями (61) и (62), находим

$$p_{rt}(q'_t, q'') = \frac{\partial S(q'_t, q'')}{\partial q'_{rt}}, \quad p_r(q'_t, q'') = - \frac{\partial S(q'_t, q'')}{\partial q''_r}.$$

Это означает, что выполняются равенства

$$p_{rt} = \frac{\partial S(q_t, q)}{\partial q_{rt}}, \quad p_r = - \frac{\partial S(q_t, q)}{\partial q_r}, \quad (64)$$

если предполагать, что правая часть формулы (64) записана в упорядоченном виде.

Эти уравнения имеют тот же вид, что и уравнения (54) и (56), но относятся к некоммутирующим квантовым переменным  $q_t, q$ , а не к обычным алгебраическим переменным  $q'_t, q''$ . Они показывают, какой смысл имеет аналогия между условием унитарности преобразования квантовых переменных и требованием, чтобы преобразование классических переменных являлось касательным. Аналогия не является, однако, полной, потому что классическая функция  $S$  должна быть вещественной, а соответствующее простое условие для функции  $S$  в формуле (64) отсутствует \*).

---

\*) О связи между унитарным преобразованием и касательными преобразованиями классической механики см. приложение, (Прим. В. А. Фока.)



### § 33. Ансамбль Гиббса

До сих пор в нашей книге мы все время предполагали, что рассматриваемая динамическая система в каждый момент времени находится в определенном состоянии, иными словами, что ее движение задано настолько полно и точно, насколько это возможно сделать, не нарушая общих принципов теории. В классической теории это означало бы, очевидно, что значения всех координат и импульсов заданы. Может случиться, однако, что нас интересует движение, которое задано не с такой максимальной полнотой. Настоящий параграф будет посвящен тем методам, которые следует применять в этом случае.

В классической механике для этого существует способ так называемого *ансамбля Гиббса*, идея которого заключается в следующем. Мы рассматриваем все динамические координаты и импульсы как декартовы координаты в некотором *фазовом пространстве*, число измерений которого вдвое больше числа степеней свободы системы. Любое состояние системы может быть изображено точкой в этом пространстве. Эта точка будет двигаться согласно классическим уравнениям движения (14). Допустим теперь, что нам неизвестно, в каком именно состоянии находится система, а известна лишь вероятность того, что система находится в том или ином состоянии из некоторого множества состояний. Можно было бы изобразить такое состояние системы в виде жидкости в фазовом пространстве, масса которой в произвольном объеме фазового пространства равна полной вероятности того, что система находится в каком-либо из состояний, изображаемых точками этого объема. Каждая частица такой жидкости будет двигаться согласно уравнениям движения (14). Введем плотность  $\rho$  этой жидкости в данной точке, равную вероятности (на единицу объема фазового пространства) того, что система будет близка к данному состоянию. Тогда будет выполняться уравнение неразрывности

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= - \sum_r \left\{ \frac{\partial}{\partial q_r} \left( \rho \frac{dq_r}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_r} \left( \rho \frac{dp_r}{dt} \right) \right\} = \\ &= - \sum_r \left\{ \frac{\partial}{\partial q_r} \left( \rho \frac{\partial H}{\partial p_r} \right) - \frac{\partial}{\partial p_r} \left( \rho \frac{\partial H}{\partial q_r} \right) \right\} = - [\rho, H]. \quad (65) \end{aligned}$$

Его можно рассматривать как уравнение движения для жидкости, так как оно определяет плотность  $\rho$  для всех моментов времени, если задано начальное значение  $\rho$  как функции координат  $q$  и импульсов  $p$ . Если не считать знака минус, это уравнение имеет тот же вид, что и обычное уравнение движения (15) для динамической переменной.

То требование, что полная вероятность нахождения системы в каком-либо состоянии должна быть равна единице, приводит к условию нормировки для  $\rho$

$$\iint \rho \, dq \, dp = 1, \quad (66)$$

где интегрирование производится по всему фазовому пространству, а дифференциалы  $dq$  или  $dp$  означают произведение всех  $dq$  или всех  $dp$ . Если  $\beta$  есть некоторая функция динамических переменных, то ее среднее значение равно

$$\iint \beta \rho \, dq \, dp. \quad (67)$$

Несущественное, хотя и удобное для облегчения многих рассуждений, видоизменение теории получится, если пользоваться плотностью  $\rho$ , которая отличается от прежней некоторым положительным множителем  $k$ . Тогда вместо уравнения (66) получаем

$$\iint \rho \, dq \, dp = k.$$

С помощью этой плотности мы можем представить себе, что жидкость изображает  $k$  одинаковых динамических систем, которые движутся независимо, без взаимных возмущений и без взаимодействия в одном и том же месте пространства. Плотность в данной точке будет тогда равна вероятному или среднему числу систем на единицу объема фазового пространства, находящихся вблизи данного состояния, а выражение (67) даст среднее значение  $\beta$  для всех этих систем. Такая совокупность динамических систем и есть ансамбль, введенный Гиббсом. Ансамбль Гиббса обыкновенно нельзя осуществить практически, разве что в грубом приближении, но тем не менее он является полезной теоретической абстракцией.

Убедимся теперь, что в квантовой механике существует соответствующая плотность  $\rho$  с аналогичными свойствами. Она была впервые введена фон Нейманом. То, что она существует, является даже несколько неожиданным фактом,

поскольку понятие о фазовом пространстве в квантовой механике уже не имеет смысла ввиду того, что координатам  $q$  и импульсам  $p$  невозможно приписать одновременно определенные численные значения.

Рассмотрим динамическую систему, которая в определенный момент времени может находиться с известной вероятностью в том или ином состоянии из некоторой совокупности состояний. Эти состояния могут составлять либо дискретную совокупность, либо сплошную, либо то и другое вместе. Будем для определенности рассматривать дискретный случай, и будем нумеровать состояния индексом  $m$ . Пусть  $|m\rangle$  — нормированный кет-вектор, характеризующий состояние  $m$ , а  $P_m$  — вероятность того, что система находится в этом состоянии. Определим тогда квантовую плотность  $\rho$  формулой

$$\rho = \sum_m |m\rangle P_m \langle m|. \quad (68)$$

Пусть  $\rho'$  есть некоторое собственное значение  $\rho$  и  $|\rho'\rangle$  — собственный кет-вектор с этим собственным значением. Тогда имеем

$$\sum_m |m\rangle P_m \langle m|\rho'\rangle = \rho|\rho'\rangle = \rho'|\rho'\rangle.$$

Отсюда получаем

$$\sum_m \langle\rho'|m\rangle P_m \langle m|\rho'\rangle = \rho' \langle\rho'|\rho'\rangle$$

или

$$\sum_m P_m |\langle m|\rho'\rangle|^2 = \rho' \langle\rho'|\rho'\rangle,$$

но число  $P_m$ , будучи вероятностью, никогда не может быть отрицательным. Отсюда следует, что  $\rho'$  не может быть отрицательным. Таким образом,  $\rho$  не имеет отрицательных собственных значений, в соответствии с тем фактом, что классическая плотность  $\rho$  не может быть отрицательной.

Выведем теперь уравнение движения для квантовой плотности  $\rho$ . В шредингеровской картине кет-векторы и бра-векторы в формуле (68) будут изменяться со временем согласно уравнению Шредингера (5) и согласно сопряженному уравнению, при этом вероятности  $P_m$  будут оставаться постоянными, поскольку система до тех пор, пока отсут-

ствуют возмущения, не может перейти из состояния, которое характеризуется одним вектором, удовлетворяющим уравнению Шредингера, в состояние, характеризующееся другим вектором. Таким образом, мы имеем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dp}{dt} &= \sum_m i\hbar \left\{ \frac{d|m\rangle}{dt} P_m \langle m| + |m\rangle P_m \frac{d\langle m|}{dt} \right\} = \\ &= \sum_m \{ H|m\rangle P_m \langle m| - |m\rangle P_m \langle m| H \} = H\rho - \rho H. \quad (69) \end{aligned}$$

Это уравнение и является квантовым аналогом классического уравнения движения (65). Квантовая плотность  $\rho$ , подобно классической, однозначно определяется для всех моментов времени по заданному начальному значению.

Согласно предположению, сделанному в § 12, среднее значение наблюдаемой  $\beta$ , когда система находится в состоянии  $m$ , равно  $\langle m|\beta|m\rangle$ . Отсюда следует, что если система может находиться с вероятностями  $P_m$  в различных состояниях  $m$ , то среднее значение  $\beta$  будет равно  $\sum_m P_m \langle m|\beta|m\rangle$ .

Если ввести представление, в котором базисные кет-векторы  $|\xi'\rangle$  образуют дискретную совокупность, то это выражение примет вид

$$\begin{aligned} \sum_{m\xi'} P_m \langle m|\xi'\rangle \langle \xi'|\beta|m\rangle &= \sum_{\xi'm} \langle \xi'|\beta|m\rangle P_m \langle m|\xi'\rangle = \\ &= \sum_{\xi'} \langle \xi'|\beta\rho|\xi'\rangle = \sum_{\xi'} \langle \xi'|\rho\beta|\xi'\rangle, \quad (70) \end{aligned}$$

последнее из равенств легко проверить, воспользовавшись правилом умножения матриц (уравнение (44) § 17). Выражение (70) является аналогом выражения (67) классической теории. В то время как в классической теории нужно было умножить  $\beta$  на  $\rho$  и проинтегрировать по всему фазовому пространству, в квантовой механике следует умножить  $\beta$  на  $\rho$ , взяв множители в любом порядке, и вычислить сумму диагональных элементов (след) произведения в некотором представлении. Если представление содержит непрерывную совокупность базисных векторов  $|\xi'\rangle$ , то мы вместо формулы (70) получаем

$$\int \langle \xi'|\beta\rho|\xi'\rangle d\xi' = \int \langle \xi'|\rho\beta|\xi'\rangle d\xi', \quad (71)$$

т. е. мы должны произвести «интегрирование по диагонали» вместо суммирования диагональных элементов. Выражение (71) мы будем называть диагональной суммой (следом) произведения  $\beta\rho$  для непрерывного случая. Легко убедиться, используя свойства функций преобразования (56) § 18, что диагональная сумма (след) будет одинакова во всех представлениях.

Из того условия, что векторы  $|m\rangle$  нормированы, мы получаем для дискретных  $\xi'$

$$\sum_{\xi'} \langle \xi' | \rho | \xi' \rangle = \sum_{\xi'm} \langle \xi' | m \rangle P_m \langle m | \xi' \rangle = \sum_m P_m = 1, \quad (72)$$

ибо полная вероятность нахождения системы в каком-либо из состояний равна единице. Это уравнение аналогично уравнению (66). Вероятность того, что система находится в состоянии  $\xi'$ , или вероятность того, что наблюдаемая  $\xi$ , диагональная в данном представлении, имеет значение  $\xi'$ , будет, согласно толкованию (51) § 18 представителей кет-векторов, равна

$$\sum_m |\langle \xi' | m \rangle|^2 P_m = \langle \xi' | \rho | \xi' \rangle. \quad (73)$$

Таким образом, становится ясен смысл каждого члена суммы в левой части формулы (72). Для непрерывных  $\xi'$  правая часть формулы (73) дает вероятность того, что все  $\xi$  имеют значения, близкие к значениям  $\xi'$  (вероятность, рассчитанную на единичный интервал изменения значений  $\xi'$ ).

Как и в классической теории, мы можем взять плотность в  $k$  раз большую, чем прежняя плотность  $\rho$ , и считать, что она представляет ансамбль Гиббса из  $k$  одинаковых динамических систем, которые не взаимодействуют и не возмущают друг друга. Тогда в правой части формулы (72) будет стоять  $k$ , формулы (70) или (71) будут давать полное среднее значение суммы наблюдаемых  $\beta$  для всех членов ансамбля, а (73) — вероятное число членов ансамбля, для которых все  $\xi$  равны  $\xi'$ , или, отнесенное к единичному интервалу изменения значений  $\xi'$ , число членов, для которых  $\xi$  находятся в окрестности  $\xi'$ .

Весьма важным является применение метода ансамбля Гиббса к динамической системе, которая находится в термодинамическом равновесии с окружающей средой при задан-

ной температуре  $T$ . Гиббс показал, что такая система характеризуется в классической механике плотностью

$$\rho = ce^{-H/kT}, \quad (74)$$

где  $H$  — гамильтониан, который в данном случае не зависит от времени,  $k$  — постоянная Больцмана, а  $c$  — число, которое выбирается так, чтобы выполнялось условие нормировки (66). Эта формула может быть перенесена без изменений и в квантовую теорию. При высоких температурах формула (74) принимает вид  $\rho = c$ , откуда, после подстановки в правую часть формулы (73), получаем  $c \langle \xi' | \xi' \rangle = c$  для случая дискретных  $\xi'$ . Таким образом, *при высоких температурах все дискретные состояния равновероятны.*

## ГЛАВА VI

### ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

#### § 34. Гармонический осциллятор

Простым и интересным примером динамической системы в квантовой механике является гармонический осциллятор. Этот пример важен для общей теории, так как он является краеугольным камнем теории излучения. Динамические переменные, необходимые для описания системы, — всего одна координата  $q$  и сопряженный ей импульс  $p$ . Функция Гамильтона в классической механике равна

$$H = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2 \omega^2 q^2), \quad (1)$$

где  $m$  — масса колеблющейся частицы, а  $\omega$  — частота, умноженная на  $2\pi$ . Мы предположим, что в квантовой механике оператор Гамильтона имеет такой же вид, как классическая функция Гамильтона. Этот оператор совместно с квантовыми условиями (10) § 22 полностью определяет систему.

Гейзенберговские уравнения движения имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}_t &= [q_t, H] = \frac{p_t}{m}, \\ \dot{p}_t &= [p_t, H] = -m\omega^2 q_t. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Удобно ввести безразмерную комплексную динамическую переменную \*)

$$\eta = (2m\hbar\omega)^{-1/2} (p + i m \omega q). \quad (3)$$

Из уравнений движения (2) следует

$$\dot{\eta}_t = (2m\hbar\omega)^{-1/2} (-m\omega^2 q_t + i\omega p_t) = i\omega \eta_t.$$

---

\*) Более употребительными являются операторы  $a = i\eta$  и  $a^+ = \frac{1}{i}\eta$ . (Прим. перев.)

Это уравнение может быть проинтегрировано, и приводит к формуле

$$\eta_t = \eta_0 e^{i\omega t}, \quad (4)$$

где  $\eta_0$  — линейный оператор, не зависящий от  $t$  и равный  $\eta_t$  при  $t = 0$ . Вышенаписанные уравнения вполне аналогичны уравнениям классической теории.

Мы можем выразить  $q$  и  $p$  через  $\eta$  и сопряженный  $\bar{\eta}$  и оперировать с  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ .

Имеем

$$\begin{aligned} \hbar\omega\eta\bar{\eta} &= (2m)^{-1} (p + im\omega q) (p - im\omega q) = \\ &= (2m)^{-1} [p^2 + m^2\omega^2 q^2 + im\omega (qp - pq)] = H - \frac{1}{2} \hbar\omega \end{aligned} \quad (5)$$

и аналогично

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta = H + \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (6)$$

Таким образом,

$$\bar{\eta}\eta - \eta\bar{\eta} = 1. \quad (7)$$

Уравнение (5) или (6) выражает  $H$  через  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ , а (7) дает перестановочные соотношения для  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ . Из (5) имеем

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta\bar{\eta} = \bar{\eta}H - \frac{1}{2} \hbar\omega\bar{\eta},$$

а из равенства (6)

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta\bar{\eta} = H\bar{\eta} + \frac{1}{2} \hbar\omega\bar{\eta}.$$

Таким образом,

$$\bar{\eta}H - H\bar{\eta} = \hbar\omega\bar{\eta}. \quad (8)$$

Далее, уравнение (7) приводит к соотношению

$$\bar{\eta}\eta^n - \eta^n\bar{\eta} = n\eta^{n-1} \quad (9)$$

для любого положительного целого  $n$ ; это можно показать по индукции, так как, умножая равенство (9) слева на  $\eta$ , мы получим то же равенство для значения  $n + 1$  вместо  $n$ .

Пусть  $H'$  — собственное значение  $H$ , и  $|H'\rangle$  — соответствующий этому собственному значению собственный кет-вектор. Из соотношения (5) следует

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle H' | \eta\bar{\eta} | H' \rangle &= \\ &= \langle H' | H - \frac{1}{2} \hbar\omega | H' \rangle = \left( H' - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \langle H' | H' \rangle. \end{aligned}$$



Далее,  $\langle H' | \eta \bar{\eta} | H' \rangle$  — квадрат длины кет-вектора  $\bar{\eta} | H' \rangle$  и, следовательно, должно быть

$$\langle H' | \eta \bar{\eta} | H' \rangle \geq 0,$$

причем равенство наступает только при  $\bar{\eta} | H' \rangle = 0$ . Мы имеем также  $\langle H' | H' \rangle > 0$ . Таким образом, получаем

$$H' \geq \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (10)$$

причем равенство наступает только при  $\bar{\eta} | H' \rangle = 0$ . Поскольку выражение (1) для  $H$  имеет вид суммы квадратов, следовало ожидать, что все собственные значения будут положительными или равны нулю (так как среднее значение  $H$  в любом состоянии должно быть положительным числом или нулем). Соотношение (10) дает нам уточненное условие.

Из соотношения (8) имеем

$$H \bar{\eta} | H' \rangle = (\bar{\eta} H - \hbar \omega \bar{\eta}) | H' \rangle = (H' - \hbar \omega) \bar{\eta} | H' \rangle. \quad (11)$$

Если  $H' \neq \frac{1}{2} \hbar \omega$ , то вектор  $\bar{\eta} | H' \rangle \neq 0$  и, согласно (11), является собственным кет-вектором  $H$  с собственным значением  $H' - \hbar \omega$ . Следовательно, если  $H'$  — любое собственное значение  $H \neq \frac{1}{2} \hbar \omega$ , то  $H' - \hbar \omega$  будет также собственным значением. Мы можем повторить это рассуждение и получить, что если  $H' - \hbar \omega \neq \frac{1}{2} \hbar \omega$ , то  $H' - 2\hbar \omega$  также будет собственным значением  $H$ . Продолжая таким образом, мы получим ряд собственных значений  $H', H' - \hbar \omega, H' - 2\hbar \omega, H' - 3\hbar \omega, \dots$ , который не может продолжаться до бесконечности (так как тогда найдутся собственные значения, противоречащие (10)), но может кончиться только на величине  $\frac{1}{2} \hbar \omega$ . Точно так же из уравнения, сопряженного с (8), имеем

$$H \eta | H' \rangle = (\eta H + \hbar \omega \eta) | H' \rangle = (H' + \hbar \omega) \eta | H' \rangle,$$

откуда видно, что  $H' + \hbar \omega$  — также собственное значение  $H$  и  $\eta | H' \rangle$  — собственный вектор, за исключением случая  $\eta | H' \rangle = 0$ . Этот случай, однако, невозможен, так как иначе было бы

$$0 = \hbar \omega \bar{\eta} \eta | H' \rangle = \left( H + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) | H' \rangle = \left( H' + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) | H' \rangle,$$

что противоречит (10). Таким образом,  $H' + \hbar\omega$  всегда является собственным значением  $H$ , а также  $H' + 2\hbar\omega$ ,  $H' + 3\hbar\omega$  и т. д. Следовательно, собственными значениями  $H$  является ряд чисел

$$\frac{1}{2}\hbar\omega, \quad \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad \frac{7}{2}\hbar\omega, \quad \dots, \quad (12)$$

простирающийся до бесконечности. Они являются возможными значениями энергии гармонического осциллятора. Пусть  $|0\rangle$  — собственный кет-вектор  $H$ , относящийся к наименьшему собственному значению  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ , так что

$$\eta|0\rangle = 0. \quad (13)$$

Образует последовательность кет-векторов

$$|0\rangle, \eta|0\rangle, \eta^2|0\rangle, \eta^3|0\rangle, \dots \quad (14)$$

Они все являются собственными векторами  $H$ , соответствующими собственным значениям (12). Из соотношений (9) и (13) следует

$$\eta\eta^n|0\rangle = n\eta^{n-1}|0\rangle \quad (15)$$

для любого неотрицательного целого  $n$ . Таким образом, последовательность векторов (14) такова, что действие  $\eta$  или  $\bar{\eta}$  на один из векторов последовательности дает вектор, принадлежащий этой же последовательности. Все динамические переменные в нашей задаче могут быть выражены через  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ , так что векторы (14) должны образовать полную систему (в противном случае должны были бы быть еще другие динамические переменные). Имеется всего один вектор для каждого собственного значения (12), так что оператор  $H$  сам образует полный набор коммутирующих наблюдаемых. Векторы (14) соответствуют различным стационарным состояниям осциллятора. Стационарное состояние с энергией  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ , которое характеризуется вектором  $\eta^n|0\rangle$ , называется  $n$ -м квантовым состоянием.

Квадрат длины вектора  $\eta^n|0\rangle$  равен, как следует из формулы (15),

$$\langle 0|\eta^n\eta^n|0\rangle = n\langle 0|\eta^{n-1}\eta^{n-1}|0\rangle.$$

По индукции находим, что

$$\langle 0|\eta^n\eta^n|0\rangle = n!, \quad (16)$$

если вектор  $|0\rangle$  нормирован. Следовательно, векторы (14), умноженные на  $n!^{-1/2}$ , где  $n=0, 1, 2 \dots$  образуют базис представления, именно, представления, в котором оператор  $H$  диагонален. Любой вектор  $|x\rangle$  может быть разложен в ряд

$$|x\rangle = \sum_0^{\infty} x_n \eta^n |0\rangle, \quad (17)$$

где  $x_n$  — числа. Таким путем вектор  $|x\rangle$  поставлен в соответствие ряду  $\sum x_n \eta^n$  по степеням переменной  $\eta$ , причем различные члены в этом степенном ряде соответствуют различным стационарным состояниям. Если вектор  $|x\rangle$  нормирован, то он определяет состояние, для которого вероятность нахождения осциллятора в  $n$ -м квантовом состоянии, т. е. вероятность того, что переменная  $H$  имеет собственное значение  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ , равна

$$P_n = n! |x_n|^2, \quad (18)$$

как вытекает из тех рассуждений, которые приводят к формуле (51) § 18.

Мы можем рассматривать вектор  $|0\rangle$  как стандартный, а степенной ряд по  $\eta$  — как волновую функцию (мы знаем, что любой вектор может быть выражен как такая волновая функция, умноженная на стандартный вектор). Данный вид волновой функции отличается от обычного, определяемого уравнением (62) § 20, тем, что это — функция комплексной динамической переменной  $\eta$ , а не наблюдаемой. Она была впервые введена В. А. Фоком, так что мы будем называть это представление фоковским. Для многих целей это есть представление наиболее удобное для описания состояний гармонического осциллятора. Стандартный вектор  $|0\rangle$  удовлетворяет условию (13), которое заменяет условие (43) § 22 для стандартного вектора в шредингеровском представлении.

Введем шредингеровское представление, в котором диагонально  $q$ , и найдем представители стационарных состояний. Из (13) и (3) следует

$$(p - im\omega q)|0\rangle = 0,$$

так что

$$\langle q' | p - im\omega q | 0 \rangle = 0.$$

С помощью соотношения (45) § 22 это дает

$$\hbar \frac{\partial}{\partial q'} \langle q' | 0 \rangle - m\omega q' \langle q' | 0 \rangle = 0. \quad (19)$$

Решение этого дифференциального уравнения есть

$$\langle q' | 0 \rangle = \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega q'^2 / 2\hbar}. \quad (20)$$

Численный коэффициент выбран так, чтобы  $\langle q' | 0 \rangle$  было нормированно. Мы имеем здесь представитель основного состояния, как называется состояние с наименьшей энергией. Из него могут быть получены представители других стационарных состояний. Из соотношения (3) имеем

$$\begin{aligned} \langle q' | \eta^n | 0 \rangle &= (2m\hbar\omega)^{-n/2} \langle q' | (p + im\omega q)^n | 0 \rangle = \\ &= (2m\hbar\omega)^{-n/2} i^n \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial q'} + m\omega q' \right)^n \langle q' | 0 \rangle = \\ &= i^n (2m\hbar\omega)^{-n/2} (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial q'} + m\omega q' \right)^n e^{-m\omega q'^2 / 2\hbar}. \end{aligned} \quad (21)$$

Вычисления легко проводятся при малых  $n$ . В результате получается  $e^{-m\omega q'^2 / 2\hbar}$ , умноженное на полином  $n$ -й степени от  $q'$ . Для того чтобы получить нормированный представитель  $n$ -го квантового состояния, нужно ввести в (21) множитель  $n!^{-1/2}$ . Фазовый множитель  $i^n$  можно опустить.

### § 35. Момент количества движения

Рассмотрим частицу, описываемую тремя декартовыми координатами  $x, y, z$  и сопряженными импульсами  $p_x, p_y, p_z$ . Момент количества движения частицы относительно начала координат определяется, как и в классической теории, соотношениями

$$m_x = yp_z - zp_y, \quad m_y = zp_x - xp_z, \quad m_z = xp_y - yp_x, \quad (22)$$

или в векторных обозначениях

$$\mathbf{m} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}.$$

Мы должны вычислить скобки Пуассона (СП) для комбинаций компонент момента количества движения с динамическими переменными  $x, p_x$  и т. д. и друг с другом. Это наиболее удобно сделать с помощью соотношений (4) и (5) § 21. Так,

$$\left. \begin{aligned} [m_z, x] &= [(xp_y - yp_x), x] = -y [p_x, x] = y, \\ [m_z, y] &= [(xp_y - yp_x), y] = x [p_y, y] = -x, \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

$$[m_z, z] = [(xp_y - yp_x), z] = 0 \quad (24)$$

и аналогично

$$[m_z, p_x] = p_y, \quad [m_z, p_y] = -p_x, \quad (25)$$

$$[m_z, p_z] = 0 \quad (26)$$

с соответствующими соотношениями для  $m_x$  и  $m_y$ . Далее,

$$\left. \begin{aligned} [m_y, m_z] &= [z p_x - x p_z, m_z] = z [p_x, m_z] - [x, m_z] p_z = \\ &= -z p_y + y p_z = m_x, \\ [m_z, m_x] &= m_y, \quad [m_x, m_y] = m_z. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Эти результаты те же самые, что и в классической теории.

Знак в выражениях (23), (25) и (27) можно легко запомнить, исходя из правила, что знак  $+$  имеет место в том случае, когда три динамические переменные — две в скобках в левой части равенства и третья, дающая результат, в правой части равенства — расположены в порядке циклической перестановки  $x, y, z$ . В противном случае будет знак  $-$ .

Уравнения (27) могут быть записаны в векторном виде

$$\mathbf{m} \times \mathbf{m} = i\hbar \mathbf{m}. \quad (28)$$

Предположим теперь, что мы имеем несколько частиц с моментами количества движения  $\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2$  и т. д.

Каждый из этих векторов будет удовлетворять соотношению (28), так что

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r = i\hbar \mathbf{m}_r,$$

и любые два из них будут коммутировать друг с другом, так что

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r = 0 \quad (r \neq s).$$

Следовательно, если  $\mathbf{M} = \sum_r \mathbf{m}_r$  — полный момент количества движения, то

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \times \mathbf{M} &= \sum_{rs} \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s = \sum_r \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r + \\ &+ \sum_{r < s} (\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r) = i\hbar \sum_r \mathbf{m}_r = i\hbar \mathbf{M}. \end{aligned} \quad (29)$$

Этот результат имеет тот же вид, что и (28), так что компоненты полного момента количества движения  $\mathbf{M}$  для любого числа частиц удовлетворяют тем же самым перестановочным соотношениям, что и для одной частицы.

Пусть  $A_x, A_y, A_z$  обозначают три координаты некоторой частицы, или же три компоненты импульса некоторой частицы.

Величины  $A$  будут коммутировать с моментом количества движения другой частицы, и следовательно, из соотношений (23) — (26), получаем

$$[M_z, A_x] = A_y, \quad [M_z, A_y] = -A_x, \quad [M_z, A_z] = 0. \quad (30)$$

Если  $B_x, B_y, B_z$  — другая совокупность трех величин, обозначающих координаты или компоненты импульса одной из частиц, то они будут удовлетворять соотношениям, аналогичным (30). Следовательно, будем иметь

$$\begin{aligned} [M_z, (A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z)] &= \\ &= [M_z, A_x] B_x + A_x [M_z, B_x] + [M_z, A_y] B_y + A_y [M_z, B_y] = \\ &= A_y B_x + A_x B_y - A_x B_y - A_y B_x = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, скалярное произведение  $A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$  коммутирует с  $M_z$  и аналогично с  $M_x$  и  $M_y$ . Вводя векторное произведение

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

или

$$A_y B_z - A_z B_y = C_x, \quad A_z B_x - A_x B_z = C_y, \quad A_x B_y - A_y B_x = C_z,$$

имеем

$$[M_z, C_x] = -A_x B_z + A_z B_x = C_y$$

и аналогично

$$[M_z, C_y] = -C_x, \quad [M_z, C_z] = 0.$$

Эти соотношения опять имеют вид уравнений (30), в которых вместо  $\mathbf{A}$  стоит  $\mathbf{C}$ . Мы можем отсюда заключить, что уравнения вида (30) справедливы для трех компонент любого вектора, который можно построить из наших динамических переменных, и что любой скаляр коммутирует с  $\mathbf{M}$ .

Мы можем ввести линейный оператор  $R$ , относящийся к вращению вокруг начала координат, таким же образом, как мы ввели линейный оператор  $D$  в § 25, относящийся к сдвигу. Производя вращение на угол  $\delta\phi$  вокруг оси  $z$  и считая  $\delta\phi$  бесконечно малым, мы можем получить в пределе оператор, соответствующий (64) § 25, а именно, оператор

$$\lim_{\delta\phi \rightarrow 0} (R - 1)/\delta\phi,$$

который мы назовем *оператором вращения* вокруг оси  $z$  и обозначим через  $r_z$ . Подобно оператору сдвига,  $r_z$  — чисто-мнимый линейный оператор, определенный с точностью до чисто-мнимой аддитивной постоянной. Соответственно равенству (66) § 25 изменение любой динамической переменной  $v$ , вызванное вращением на малый угол  $\delta\varphi$  вокруг оси  $z$ , есть

$$\delta\varphi (r_z v - v r_z) \quad (31)$$

с точностью до величин второго порядка относительно  $\delta\varphi$ . Далее, изменения трех компонент вектора  $A_x, A_y, A_z$  при вращении  $\delta\varphi$  вокруг оси  $z$ , которому подвергается вся измерительная аппаратура, равны соответственно  $\delta\varphi A_y, -\delta\varphi A_x, 0$ , любая же скалярная величина остается при вращении неизменной. Приравнивая эти изменения выражению (31), получим

$$\begin{aligned} r_z A_x - A_x r_z &= A_y, & r_z A_y - A_y r_z &= -A_x, \\ r_z A_z - A_z r_z &= 0. \end{aligned}$$

Кроме того,  $r_z$  коммутирует с любым скаляром. Сравнивая эти результаты с соотношениями (30), мы видим, что оператор  $i\hbar r_z$  удовлетворяет тем же перестановочным соотношениям, что и  $M_z$ . Их разность  $M_z - i\hbar r_z$  коммутирует с любой динамической переменной и, следовательно, должна быть числом. Это число, являющееся по необходимости вещественным, так как  $M_z$  и  $i\hbar r_z$  вещественны, может быть сделано равным нулю путем выбора чисто-мнимой аддитивной постоянной в  $r_z$ . Таким образом, имеем

$$M_z = i\hbar r_z. \quad (32)$$

Такие же уравнения справедливы для  $M_x$  и  $M_y$ . Они аналогичны уравнениям (69) § 25. Итак, *полный момент количества движения связан с оператором вращения так же, как полный импульс связан с оператором сдвига. Это заключение справедливо при любом выборе начала координат.*

Вышеприведенные рассуждения относятся к моменту количества движения, возникающему при движении частиц, определяемому для каждой частицы соотношением (22). Имеется еще другой вид момента количества движения, встречающийся в атомной теории — *спиновый момент количества движения*. Предыдущий вид момента количества

движения для отличия мы будем называть *орбитальным моментом количества движения*.

Спиновый момент частицы следует представлять себе как результат некоторого внутреннего движения частицы, так что он связан со степенями свободы, отличающимися от тех, которые описывают движение частицы как целого. Следовательно, динамические переменные, описывающие спин, должны коммутировать с  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$ . Спин не имеет близкого соответствия с чем-либо в классической механике, так что метод классических аналогий не подходит для его изучения. Однако мы можем построить теорию спина просто, предполагая, что компоненты спинового момента связаны с оператором вращения таким же образом, как компоненты орбитального момента, т. е. что уравнение (32) справедливо для  $M_z$ , рассматриваемого как компонента спина по оси  $z$  и  $r_z$  — как оператора вращения вокруг оси  $z$ , относящегося к состоянию спина частицы. При этом предположении перестановочные соотношения, связывающие компоненты спинового момента  $M$  с любым вектором  $A$ , относящимся к спину, должны иметь вид (30). Следовательно, взяв в качестве  $A$  спиновый момент количества движения, мы получим уравнение (29), справедливое также для спина. Тогда уравнение (29) будет удовлетворяться всегда, т. е. для любой суммы орбитального и спинного моментов. Уравнение (30) также будет удовлетворяться всегда, если разуместь под  $M$  полный орбитальный и спиновый момент и под  $A$  — любую векторную динамическую переменную; связь между моментом количества движения и оператором вращения останется в силе.

В качестве непосредственного следствия этой связи можно вывести *закон сохранения момента количества движения*.

Для изолированной системы оператор Гамильтона не должен меняться при любом вращении вокруг начала координат. Другими словами, он должен быть скаляром, и значит, должен коммутировать с моментом количества движения относительно начала координат. Таким образом, момент количества движения является интегралом движения. В этом рассуждении началом координат может быть любая точка.

В качестве другого непосредственного следствия мы можем вывести, что *состояние с нулевым полным моментом количества движения является сферически симметричным*.



Это состояние характеризуется кет-вектором, скажем  $|S\rangle$ , удовлетворяющим соотношениям

$$M_x|S\rangle = M_y|S\rangle = M_z|S\rangle = 0$$

и, следовательно,

$$r_x|S\rangle = r_y|S\rangle = r_z|S\rangle = 0.$$

Отсюда видно, что кет-вектор  $|S\rangle$  не меняется при бесконечно малом повороте и, следовательно, не может меняться при конечном повороте, так как поворот на конечный угол может быть построен из бесконечно малых поворотов. Значит, состояние сферически симметрично. Обратная теорема, именно: *сферически симметричное состояние имеет нулевой полный момент количества движения*, также верна, хотя ее доказательство не столь простое. Сферически симметричное состояние соответствует вектору  $|S\rangle$ , направление которого не меняется при любом вращении. Следовательно, изменение  $|S\rangle$ , вызванное оператором вращения  $r_x$ ,  $r_y$  или  $r_z$ , должно сводиться к умножению  $|S\rangle$  на числовой множитель, скажем

$$r_x|S\rangle = c_x|S\rangle, \quad r_y|S\rangle = c_y|S\rangle, \quad r_z|S\rangle = c_z|S\rangle,$$

где  $c$  — числа. Отсюда следует

$$\begin{aligned} M_x|S\rangle &= i\hbar c_x|S\rangle, & M_y|S\rangle &= i\hbar c_y|S\rangle, \\ M_z|S\rangle &= i\hbar c_z|S\rangle. \end{aligned} \quad (33)$$

Эти уравнения несовместимы с перестановочными соотношениями (29) для  $M_x$ ,  $M_y$ ,  $M_z$ , за исключением случая  $c_x = c_y = c_z = 0$ , а это и значит, что состояние соответствует нулевому полному моменту количества движения. В уравнениях (33) мы имеем пример вектора состояния, являющегося одновременно собственным вектором трех некоммутирующих линейных операторов  $M_x$ ,  $M_y$ ,  $M_z$ , что возможно лишь при обращении в нуль всех трех собственных значений.

### § 36. Свойства момента количества движения

Существуют некоторые общие свойства момента количества движения, которые вытекают из одних только перестановочных соотношений между тремя компонентами. Эти свойства относятся в равной мере к спиновому и орбитальному моментам. Пусть  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$  — три компоненты мо-

мента количества движения. Введем величину  $\beta$ , определяемую соотношением

$$\beta = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2.$$

Так как  $\beta$  — скаляр, то эта величина должна коммутировать с  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$ . Предположим, что мы имеем динамическую систему, для которой  $m_x$ ,  $m_y$  и  $m_z$  являются единственными динамическими переменными. Тогда  $\beta$  коммутирует с любой динамической переменной, и поэтому величина  $\beta$  должна быть числом. Мы можем изучать такую динамическую систему почти тем же путем, какой был использован для гармонического осциллятора в § 34.

Положим

$$m_x - im_y = \eta.$$

Из перестановочных соотношений (27) получаем

$$\begin{aligned} \bar{\eta}\eta &= (m_x + im_y)(m_x - im_y) = m_x^2 + m_y^2 - i(m_x m_y - m_y m_x) = \\ &= \beta - m_z^2 + \hbar m_z, \end{aligned} \quad (34)$$

а также равенство

$$\eta\bar{\eta} = \beta - m_z^2 - \hbar m_z. \quad (35)$$

Таким образом, имеем

$$\bar{\eta}\eta - \eta\bar{\eta} = 2\hbar m_z. \quad (36)$$

Точно так же

$$m_z\eta - \eta m_z = i\hbar m_y - \hbar m_x = -\hbar\eta. \quad (37)$$

Предположим, что компоненты момента количества движения являются наблюдаемыми, и, таким образом,  $m_z$  имеет собственные значения. Пусть  $m'_z$  — одно из них; и  $|m'_z\rangle$  — собственный кет-вектор, относящийся к нему. Из соотношения (34) имеем

$$\begin{aligned} \langle m'_z | \bar{\eta}\eta | m'_z \rangle &= \langle m'_z | \beta - m_z^2 + \hbar m_z | m'_z \rangle = \\ &= (\beta - m'^2_z + \hbar m'_z) \langle m'_z | m'_z \rangle. \end{aligned}$$

Здесь левая сторона — квадрат длины вектора  $\eta |m'_z\rangle$ , и, следовательно, больше или равна нулю, причем случай равенства наступает тогда и только тогда, когда  $\eta |m'_z\rangle = 0$ . Значит,

$$\beta - m'^2_z + \hbar m'_z \geq 0$$

или

$$\beta + \frac{1}{4} \hbar^2 \geq \left(m'_z - \frac{1}{2} \hbar\right)^2, \quad (38)$$

так что

$$\beta + \frac{1}{4} \hbar^2 \geq 0.$$

Определим число  $k$  формулой

$$k + \frac{1}{2} \hbar = \left( \beta + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{1/2} = \left( m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{1/2}, \quad (39)$$

так что  $k \geq -\frac{1}{2} \hbar$ . Тогда неравенство (38) примет вид

$$k + \frac{1}{2} \hbar \geq \left| m'_z - \frac{1}{2} \hbar \right|$$

или

$$k + \hbar \geq m'_z \geq -k. \quad (40)$$

Знак равенства имеет место в том и только в том случае, если  $\eta | m'_z \rangle = 0$ . Аналогично из соотношения (35) получаем

$$\langle m'_z | \eta \bar{\eta} | m'_z \rangle = (\beta - m_z'^2 - \hbar m'_z) \langle m'_z | m'_z \rangle,$$

откуда видно, что

$$\beta - m_z'^2 - \hbar m'_z \geq 0$$

или

$$k \geq m'_z \geq -k - \hbar,$$

причем знак равенства имеет место тогда и только тогда, когда  $\bar{\eta} | m'_z \rangle = 0$ .

Комбинируя этот результат с неравенством (40), получим  $k \geq 0$  и

$$k \geq m'_z \geq -k, \quad (41)$$

причем  $m'_z = k$ , если  $\bar{\eta} | m'_z \rangle = 0$  и  $m'_z = -k$ , если  $\eta | m'_z \rangle = 0$ .

Из соотношения (37) следует

$$m_z \eta | m'_z \rangle = (\eta m_z - \hbar \eta) | m'_z \rangle = (m'_z - \hbar) \eta | m'_z \rangle.$$

Теперь, если  $m'_z \neq -k$ , то  $\eta | m'_z \rangle \neq 0$  и, следовательно, является собственным кет-вектором  $m_z$ , соответствующим собственному значению  $m'_z - \hbar$ . Аналогично, если  $m'_z - \hbar \neq -k$ , то  $m'_z - 2\hbar$  будет другим собственным значением  $m_z$  и т. д. Мы получаем таким путем ряд собственных значений  $m'_z$ ,  $m'_z - \hbar$ ,  $m'_z - 2\hbar$ , ..., который должен обрываться согласно условию (41) и может обрываться только на величине  $-k$ .

Из уравнения, сопряженного с (37), имеем

$$m_z \bar{\eta} |m'_z\rangle = (\bar{\eta} m_z + \hbar \bar{\eta}) |m'_z\rangle = (m'_z + \hbar) \bar{\eta} |m'_z\rangle,$$

откуда следует, что  $m'_z + \hbar$  является еще одним собственным значением  $m_z$ , за исключением случая  $\bar{\eta} |m'_z\rangle = 0$ , когда  $m'_z = k$ . Продолжая таким же образом, мы получим ряд собственных значений  $m'_z, m'_z + \hbar, m'_z + 2\hbar, \dots$ , который, согласно условию (41), должен обрываться и может обрываться только на величине  $k$ . Мы можем заключить, что  $2k$  является целым кратным  $\hbar$  и что собственными значениями  $m_z$  являются

$$k, k - \hbar, k - 2\hbar, \dots, -k + \hbar, -k. \quad (42)$$

Вследствие симметрии собственные значения  $m_x$  и  $m_y$  те же самые. Эти собственные значения являются все или целыми кратными  $\hbar$ , или нечетными кратными  $\frac{1}{2}\hbar$  в зависимости от того, является ли  $2k$  четным или нечетным кратным  $\hbar$ .

Обозначим через  $|\max\rangle$  — собственный кет-вектор  $m_z$ , соответствующий максимальному собственному значению  $k$ , так что

$$\bar{\eta} |\max\rangle = 0, \quad (43)$$

и образуем последовательность собственных кет-векторов, которую обозначим через

$$|\max\rangle, \eta |\max\rangle, \eta^2 |\max\rangle, \dots, \eta^{2k/\hbar} |\max\rangle. \quad (44)$$

Эти векторы все являются собственными векторами  $m_z$ , соответствующими последовательности собственных значений (42). Последовательность векторов (44) такова, что действие оператора  $\eta$  на какой-либо из них дает вектор, также принадлежащий последовательности (действие  $\eta$  на последний из векторов (44) дает нуль). Из соотношений (36) и (43) видно, что действие  $\bar{\eta}$  на какой-либо вектор из последовательности также дает вектор, принадлежащий к последовательности. Все динамические переменные рассматриваемой системы могут быть выражены через  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ , так что последовательность векторов (44) является полной. Для каждого собственного значения (42) оператора  $m_z$  имеется всего один собственный вектор, так что переменная  $m_z$  сама по себе образует полный набор коммутирующих наблюдаемых.

Удобнее принять в качестве величины вектора момента количества движения величину  $k$ , определяемую из (39), а не величину  $\beta$ , поскольку возможными значениями  $k$  являются

$$0, \frac{1}{2} \hbar, \hbar, \frac{3}{2} \hbar, 2\hbar, \dots, \quad (45)$$

тогда как собственные значения  $\beta$  даются более сложной последовательностью чисел.

Для динамической системы, содержащей другие динамические переменные наряду с  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$ , могут быть переменные, которые не коммутируют с  $\beta$ . Тогда  $\beta$  уже не будет более числом, а будет линейным оператором. Это имеет место для любого орбитального момента количества движения (22), так как  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$  не коммутируют с  $\beta$ . Мы будем предполагать, что  $\beta$  всегда наблюдаемая, и  $k$  может быть поэтому выражено, согласно (39), через положительный квадратный корень и тоже является наблюдаемой. Мы будем называть  $k$ , определенное таким образом, величиной вектора момента количества движения  $\mathbf{m}$  в общем случае. Проведенное выше рассмотрение, с помощью которого мы получили собственные значения  $m_z$ , остается применимым, если мы заменим вектор  $|m'_z\rangle$  на общий собственный вектор  $|k'm'_z\rangle$  коммутирующих переменных  $k$  и  $m_z$ . Оно приводит к результату, что возможными собственными значениями  $k$  являются числа (45), и для каждого собственного значения  $k'$  переменной  $k$  собственными значениями  $m_z$  являются числа (42), где  $k$  заменено на  $k'$ . Мы имеем здесь пример явления, не встречавшегося ранее, — случай двух коммутирующих наблюдаемых, когда собственные значения одной зависят от того, какие значения приписываются другой. Это явление можно объяснить тем, что обе наблюдаемые не являются полностью независимыми, а в некоторой степени зависят друг от друга. Число независимых векторов, являющихся одновременно собственными векторами  $k$  и  $m_z$ , соответствующими собственным значениям  $k'$  и  $m'_z$ , не должно зависеть от  $m'_z$ . Действительно, если дано  $m'_z$  из последовательности (42), то для каждого независимого кет-вектора  $|k'm'_z\rangle$  мы можем получить независимый кет-вектор  $|k'm'_z\rangle$  путем умножения кет-вектора  $|k'm'_z\rangle$  на подходящую степень  $\eta$  или  $\bar{\eta}$ .

В качестве примера рассмотрим динамическую систему с двумя моментами  $\mathbf{m}_1$  и  $\mathbf{m}_2$ , коммутирующими друг с другом. Если нет других динамических переменных, то все динамические переменные коммутируют с величинами  $k_1$  и  $k_2$  векторов  $\mathbf{m}_1$  и  $\mathbf{m}_2$ , так что  $k_1$  и  $k_2$  являются числами. Однако величина  $K$  результирующего момента  $\mathbf{M} = \mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2$  не является числом ( $K$  не коммутирует со слагаемыми  $\mathbf{m}_1$  и  $\mathbf{m}_2$ ). Представляет интерес найти собственные значения  $K$ . Это может быть сделано проще всего путем подсчета независимых собственных векторов. Имеется один независимый вектор, являющийся одновременно собственным вектором операторов  $m_{1z}$  и  $m_{2z}$ , соответствующим некоторому  $m'_{1z}$  из совокупности  $k_1, k_1 - \hbar, k_1 - 2\hbar, \dots, -k_1$  и некоторому  $m'_{2z}$  из совокупности  $k_2, k_2 - \hbar, k_2 - 2\hbar, \dots, -k_2$ . Он является собственным вектором оператора  $M_z$ , соответствующим собственному значению  $M'_z = m'_{1z} + m'_{2z}$ . Возможными значениями  $M'_z$  являются, таким образом, числа  $k_1 + k_2, k_1 + k_2 - \hbar, k_1 + k_2 - 2\hbar, \dots, -k_1 - k_2$ . Число, показывающее сколько раз встречается каждый из них, дается следующей схемой (мы полагаем для определенности  $k_1 \geq k_2$ ):

$$\left. \begin{array}{ccccccc} k_1 + k_2, & k_1 + k_2 - \hbar, & k_1 + k_2 - 2\hbar, & \dots, & k_1 - k_2, & k_1 - k_2 - \hbar, & \dots, \\ 1 & 2 & 3 & \dots & 2k_2 + 1 & 2k_2 + 2 & \dots \\ & & & & \dots - k_1 + k_2, & -k_1 + k_2 - \hbar, & \dots - k_1 - k_2 \\ & & & & \dots 2k_2 + 1 & 2k_2 & \dots 1 \end{array} \right\} \quad (46)$$

Далее, каждое собственное значение  $K'$  величины  $K$  может комбинироваться с собственными значениями  $K', K' - \hbar, K' - 2\hbar, \dots, -K'$  величины  $M_z$ , с тем же самым числом независимых собственных векторов  $K$  и  $M_z$  для каждого из них. Полное число независимых собственных векторов оператора  $M_z$ , соответствующих собственному значению  $M'_z$ , должно быть тем же самым независимо от того, рассматриваем ли мы их как общие собственные векторы операторов  $m_{1z}$  и  $m_{2z}$  или операторов  $K$  и  $M_z$ , т. е. всегда дается схемой (46). Отсюда следует, что собственными значениями  $K$  являются

$$k_1 + k_2, k_1 + k_2 - \hbar, k_1 + k_2 - 2\hbar, \dots, k_1 - k_2 \quad (47)$$

и что для каждого из этих собственных значений операторов  $K$  и соответствующего собственного оператора  $M_z$  имеется всего один независимый вектор, являющийся общим собственным вектором  $K$  и  $M_z$ .

Следует отметить влияние вращения на собственные векторы переменных момента количества движения. Возьмем некоторый собственный вектор  $|M'_z\rangle$  компоненты по оси  $z$  от полного момента количества движения некоторой динамической переменной и подвергнем его малому повороту вокруг оси  $z$  на угол  $\delta\varphi$ . Учитывая равенство (32), получим, что этот вектор после поворота перейдет в

$$(1 + \delta\varphi r_z) |M'_z\rangle = (1 - i\delta\varphi M_z/\hbar) |M'_z\rangle.$$

Это равенство равносильно следующему:

$$(1 - i\delta\varphi M'_z/\hbar) |M'_z\rangle = e^{-i\delta\varphi M'_z/\hbar} |M'_z\rangle$$

с точностью до членов второго порядка по  $\delta\varphi$ . Таким образом,  $|M'_z\rangle$  умножается на численный множитель  $e^{-i\delta\varphi M'_z/\hbar}$ . Произведя последовательность малых вращений, мы найдем, что поворот на конечный угол  $\varphi$  вокруг оси  $z$  вызывает умножение величины  $|M'_z\rangle$  на  $e^{-i\varphi M'_z/\hbar}$ .

Полагая  $\varphi = 2\pi$ , мы находим, что полный оборот вокруг оси  $z$  не меняет  $|M'_z\rangle$ , если собственное значение  $M'_z$  есть целое — кратное  $\hbar$ , и меняет знак, если  $M'_z$  равно полуцелому числу  $\hbar$ . Рассмотрим теперь собственный вектор  $|K'\rangle$  величины  $K$ . Если собственное значение  $K'$  является целым кратным  $\hbar$ , то возможные собственные значения  $M_z$  являются все целыми кратными  $\hbar$ , и полный оборот вокруг оси  $z$  не меняет  $|K'\rangle$ . Наоборот, если  $K'$  равно полуцелому числу  $\hbar$ , то все собственные значения  $M$  будут полуцелыми числами  $\hbar$ , и полный оборот вокруг оси  $z$  приводит к перемене знака  $|K'\rangle$ . Вследствие симметрии вращение вокруг любой другой оси приводит к тому же результату для  $|K'\rangle$ . Мы получаем, таким образом, *общий результат: при полном обороте вокруг некоторой оси знак вектора состояния меняется или остается неизменным в зависимости от того, соответствует ли вектор состояния такому собственному значению величины полного момента количества движения, которое является целым кратным  $\hbar$ , или такому, которое является*

нечетным кратным  $\frac{1}{2}\hbar$ . Состояние, очевидно, не изменяется при полном обороте, поскольку состояние не меняется при перемене знака соответствующего вектора.

Для динамической системы, включающей только орбитальные моменты количества движения, вектор не должен меняться при повороте вокруг оси. Действительно, тогда можно ввести шредингеровское представление, в котором все координаты диагональны, и шредингеровский представитель вектора состояния будет принимать при полном обороте начальное значение. Отсюда следует, что *собственные значения величины орбитального момента количества движения всегда являются целыми кратными  $\hbar$* . Собственные значения компоненты орбитального момента также всегда целые кратные  $\hbar$ . Для спина шредингеровское представление не существует, и здесь возможны оба типа собственных значений.

### § 37. Спин электрона

Электроны, а также некоторые другие элементарные частицы (протоны, нейтроны) имеют спин, величина которого равна  $\frac{1}{2}\hbar$ . Это установлено на опыте, и, кроме того, имеются теоретические основания, указывающие на то, что эта величина спина более элементарна, чем любая другая, даже чем нулевой спин (см. гл. XI). Поэтому изучение этого частного значения спина особенно важно.

При рассмотрении момента количества движения  $\mathbf{m}$ , величина которого равна  $\frac{1}{2}\hbar$ , удобно положить

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}. \quad (48)$$

Компоненты вектора  $\boldsymbol{\sigma}$  удовлетворяют, согласно формулам (27), соотношениям

$$\left. \begin{aligned} \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y &= 2i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z &= 2i\sigma_y, \\ \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x &= 2i\sigma_z. \end{aligned} \right\} \quad (49)$$



Собственными значениями  $m_z$  являются  $\frac{1}{2}\hbar$  и  $-\frac{1}{2}\hbar$ , так что собственными значениями  $\sigma_z$  будут 1 и  $-1$ , а  $\sigma_z^2$  будет иметь всего одно собственное значение, равное 1.

Отсюда следует, что  $\sigma_z^2$  должно быть равно 1, и аналогично  $\sigma_x^2$  и  $\sigma_y^2$ , т. е.

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \quad (50)$$

Мы можем преобразовать уравнения (49) и (50) к более простому виду, применяя непосредственно правила некоммутативной алгебры. Из равенства (50) получаем

$$\sigma_y^2 \sigma_z - \sigma_z \sigma_y^2 = 0$$

или

$$\sigma_y (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) + (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) \sigma_y = 0,$$

откуда, принимая во внимание соотношения (49), имеем

$$\sigma_y \sigma_x + \sigma_x \sigma_y = 0.$$

Это означает, что  $\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x$ . Две динамические переменные или два линейных оператора, удовлетворяющие закону умножения, как бы коммутативному, но с обратным знаком, мы будем называть *антикоммутативными*. Следовательно,  $\sigma_x$  антикоммутирует с  $\sigma_y$ . Вследствие симметрии каждая из трех динамических переменных  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  должна антикоммутировать с любой другой. Уравнения (49) могут быть теперь записаны в виде

$$\left. \begin{aligned} \sigma_y \sigma_z &= i \sigma_x = -\sigma_z \sigma_y, \\ \sigma_z \sigma_x &= i \sigma_y = -\sigma_x \sigma_z, \\ \sigma_x \sigma_y &= i \sigma_z = -\sigma_y \sigma_x. \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

Мы имеем также, учитывая (50),

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i. \quad (52)$$

Уравнения (50), (51), (52) являются основными уравнениями, которым удовлетворяет спинная переменная  $\sigma$  при величине спина  $\frac{1}{2}\hbar$ .

Установим матричное представление для величин  $\sigma$ , причем будем считать  $\sigma_z$  диагональной. Если в рассматриваемой системе нет других независимых динамических переменных, кроме  $m$  или  $\sigma$ , то  $\sigma_z$  само по себе образует полный набор

коммутирующих наблюдаемых, поскольку, согласно соотношениям (50) и (51), нельзя построить из  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$  другой динамической переменной, которая коммутировала бы с  $\sigma_z$ . Так как диагональные элементы матрицы, представляющей  $\sigma_z$ , являются собственными значениями  $\sigma_z$ , а они равны 1 и  $-1$ , то сама матрица  $\sigma_z$  будет

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Пусть  $\sigma_x$  представляется матрицей

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}.$$

Эта матрица должна быть эрмитовой, так что  $a_1$  и  $a_4$  должны быть вещественными, а  $a_2$  и  $a_3$  комплексно-сопряженными. Уравнение  $\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z$  дает нам

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ -a_3 & -a_4 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_3 & -a_4 \end{pmatrix},$$

так что  $a_1 = a_4 = 0$ . Следовательно,  $\sigma_x$  представляется матрицей вида

$$\begin{pmatrix} 0 & a_2 \\ a_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Уравнение  $\sigma_x^2 = 1$  дает  $a_2 a_3 = 1$ . Следовательно,  $a_2$  и  $a_3$ , будучи комплексно-сопряженными, должны иметь вид  $e^{i\alpha}$  и  $e^{-i\alpha}$  соответственно, где  $\alpha$  вещественно. Следовательно,  $\sigma_x$  представляется матрицей

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично можно показать, что  $\sigma_y$  представляется матрицей такого же вида. Путем подходящего выбора фазового множителя, который не определяется полностью условием диагональности  $\sigma_z$ , можно привести матрицу  $\sigma_x$  к виду

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица для  $\sigma_y$  тогда определится из уравнения

$$\sigma_y = i\sigma_x \sigma_z.$$

Таким образом, окончательно мы получаем три матрицы

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (53)$$

представляющие соответственно  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$ , которые удовлетворяют всем алгебраическим соотношениям (49) — (52). Проекция вектора  $\sigma$  на произвольное направление, определяемое направляющими косинусами  $l$ ,  $m$ ,  $n$ , именно  $l\sigma_x + m\sigma_y + n\sigma_z$  представляются матрицей

$$\begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix}. \quad (54)$$

Представитель вектора состояния будет образован всего двумя числами, соответствующими двум значениям  $+1$  и  $-1$  величины  $\sigma'_z$ . Эти два числа образуют функцию переменной  $\sigma'_z$ , причем область изменения этой переменной состоит только из двух точек  $+1$  и  $-1$ . Состояние, для которого  $\sigma_z$  имеет величину  $1$ , будет представлено функцией  $f_\alpha(\sigma'_z)$ , состоящей из пары чисел  $1, 0$ , а состояние, для которого  $\sigma_z = -1$ , будет представлено функцией  $f_\beta(\sigma'_z)$ , состоящей из пары чисел  $0, 1$ . Любая функция переменной  $\sigma'_z$ , т. е. любая пара чисел может быть представлена в виде линейной комбинации этих двух функций. Таким образом, *любое состояние может быть получено суперпозицией двух состояний, для которых  $\sigma_z$  равно соответственно  $+1$  и  $-1$* . Например, состояние, для которого проекция вектора  $\sigma$  на направление  $l, m, n$  (см. выражение (54)) имеет величину  $+1$ , представляется парой чисел  $a, b$ , удовлетворяющей уравнению

$$\begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{aligned} na + (l-im)b &= a, \\ (l+im)a - nb &= b. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\frac{a}{b} = \frac{l-im}{1-n} = \frac{1+n}{l+im}.$$

Это состояние можно рассматривать как суперпозицию двух состояний, для которых  $\sigma_z$  равно  $+1$  и  $-1$  с относительными весами

$$|a|^2 : |b|^2 = |l-im|^2 : |1-n|^2 = (1+n) : (1-n). \quad (55)$$

Для полного описания электрона (или другой элементарной частицы со спином  $\frac{1}{2}\hbar$ ) необходимо иметь спиновую дина-

мическую переменную  $\sigma$ , связанную со спиновым моментом количества движения формулой (48), а также декартовы координаты  $x, y, z$  и импульсы  $p_x, p_y, p_z$ . Спинные переменные коммутируют с координатами и импульсами. Следовательно, полный набор коммутирующих наблюдаемых для одного электрона будет  $x, y, z, \sigma_z$ . В том представлении, в котором эти наблюдаемые являются диагональными, представитель любого состояния будет функцией четырех переменных  $x', y', z', \sigma'_z$ . Так как область изменения  $\sigma'_z$  состоит всего из двух точек, именно,  $+1$  и  $-1$ , эта функция четырех переменных есть то же самое, что две функции трех переменных, т. е.

$$\begin{aligned} \langle x', y', z', \rangle_+ &= \langle x', y', z', +1 \rangle, \\ \langle x', y', z', \rangle_- &= \langle x', y', z', -1 \rangle. \end{aligned} \quad (56)$$

*Таким образом, существование спина может быть учтено либо путем введения новой переменной в представитель состояния, либо путем употребления двухкомпонентного представителя.*

### § 38. Движение в центральном силовом поле

Атом состоит из массивного положительно заряженного ядра и некоторого количества электронов, движущихся вокруг ядра под действием притяжения к ядру и взаимного отталкивания. Точное рассмотрение этой динамической системы является очень трудной математической задачей. Однако можно получить некоторую ориентировку в главных чертах этой системы, если в качестве грубого приближения рассматривать каждый электрон как движущийся независимо в некотором центральном поле, а именно, в поле неподвижного ядра и в усредненном поле остальных электронов. Таким образом, задача о движении частицы в центральном силовом поле является краеугольным камнем теории атома.

Пусть декартовы координаты частицы, начало отсчета которых находится в силовом центре, будут  $x, y, z$ , а соответствующие компоненты импульса —  $p_x, p_y, p_z$ . Оператор Гамильтона, в пренебрежении релятивистскими эффектами, имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V, \quad (57)$$

где  $V$  — потенциальная энергия, являющаяся функцией только от  $x^2 + y^2 + z^2$ . Для дальнейшего удобно ввести сферическую систему координат. Мы введем сначала радиус  $r$ , определенный как положительный квадратный корень

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}.$$

Его собственные значения лежат в интервале от 0 до  $\infty$ .

Если вычислить СП  $r$  с  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ , то с помощью формулы (32) § 22 мы получим

$$[r, p_x] = \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}; \quad [r, p_y] = \frac{y}{r}; \quad [r, p_z] = \frac{z}{r},$$

т. е. то же самое, что в классической теории.

Мы введем также динамическую переменную  $p_r$ , определяемую соотношением

$$p_r = r^{-1} (xp_x + yp_y + zp_z). \quad (58)$$

СП от  $p_r$  и  $r$  определяется из цепи равенств

$$\begin{aligned} r[r, p_r] &= [r, rp_r] = [r, (xp_x + yp_y + zp_z)] = \\ &= x[r, p_x] + y[r, p_y] + z[r, p_z] = \\ &= x \cdot \frac{x}{r} + y \cdot \frac{y}{r} + z \cdot \frac{z}{r} = r. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$[r, p_r] = 1$$

или

$$rp_r - p_r r = i\hbar.$$

Перестановочное соотношение между  $r$  и  $p_r$  как раз такое, как между канонической координатой и импульсом (формула (10) § 22).

Это делает  $p_r$  похожим на импульс, сопряженный с координатой  $r$ , однако соответствие здесь не точное, поскольку  $p_r$  не вещественно: выражение, сопряженное с  $p_r$ , есть

$$\begin{aligned} \bar{p}_r &= (p_x x + p_y y + p_z z) r^{-1} = (xp_x + yp_y + zp_z - 3i\hbar) r^{-1} = \\ &= (rp_r - 3i\hbar) r^{-1} = p_r - 2i\hbar r^{-1}. \end{aligned} \quad (59)$$

Оператор  $p_r - i\hbar r^{-1}$  веществен и поэтому является истинным импульсом, сопряженным с  $r$ .

Момент количества движения частицы  $\mathbf{m}$  относительно начала координат дается выражением (22), а его величина  $k$  — выражением (39). Так как  $r$  и  $p_r$  являются скалярами, то они коммутируют с  $\mathbf{m}$ , а значит и с  $k$ .

Мы можем выразить оператор Гамильтона через  $r$ ,  $p_r$  и  $k$ . Обозначая через  $\sum_{xyz}$  сумму по всем циклическим перестановкам  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и принимая во внимание выражение (59), имеем

$$\begin{aligned} k(k + \hbar) &= \sum_{xyz} m_z^2 = \sum_{xyz} (xp_y - yp_x)^2 = \\ &= \sum_{xyz} (xp_y xp_y + yp_x yp_x - xp_y yp_x - yp_x xp_y) = \\ &= \sum_{xyz} (x^2 p_y^2 + y^2 p_x^2 - xp_x p_y y - yp_y p_x x + \\ &\quad + x^2 p_x^2 - xp_x p_x x - 2i\hbar xp_x) = \\ &= (x^2 + y^2 + z^2) (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \\ &\quad - (xp_x + yp_y + zp_z) (p_x x + p_y y + p_z z + 2i\hbar) = \\ &= r^2 (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - r p_r (\bar{p}_r r + 2i\hbar) = \\ &= r^2 (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - r p_r^2 r. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{1}{r} p_r^2 r + \frac{k(k + \hbar)}{r^2} \right) + V. \quad (60)$$

Это выражение для  $H$  таково, что  $k$  коммутирует не только с  $H$ , как и должно быть, поскольку  $k$  есть интеграл движения, но также и с другими динамическими переменными, входящими в  $H$ , а именно, с  $r$ ,  $p_r$  и величиной  $V$ , являющейся функцией от  $r$ . В силу этого возникает возможность упростить задачу, а именно, мы можем рассматривать собственное состояние оператора  $k$ , относящееся к собственному значению  $k'$  и заменить в выражении (60)  $k$  на  $k'$ . После этого мы получаем задачу с одной степенью свободы  $r$ .

Введем шредингеровское представление с диагональными  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Тогда  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  будут равны соответственно

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Состояние представляется волновой функцией  $\psi(x, y, z, t)$ , удовлетворяющей уравнению Шредингера (7) § 27, которое в данном случае при операторе  $H$ , определяемом выражением (57), имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \right\} \psi. \quad (61)$$

Мы можем перейти от декартовых координат  $x, y, z$  к сферическим  $r, \theta, \varphi$  с помощью соотношений

$$\left. \begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

и можем выразить волновую функцию через сферические координаты, так что она перейдет в  $\psi(r, \theta, \varphi, t)$ . Формулы (62) дают операторное уравнение

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z},$$

из которого при сравнении с (58) получаем  $p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ .

Таким образом, принимая во внимание (60), мы получим уравнение Шредингера в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2 r^2} \right) + V \right\} \psi. \quad (63)$$

Здесь  $k$  — некоторый линейный оператор, содержащий только  $\theta, \varphi, \frac{\partial}{\partial \theta}$  и  $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ , поскольку он коммутирует с  $r$  и  $\frac{\partial}{\partial r}$ .

Из формулы

$$k(k+\hbar) = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2, \quad (64)$$

вытекающей из соотношений (39) и (62), можно получить выражение  $k(k+\hbar)$ :

$$\frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (65)$$

Этот оператор хорошо известен в математической физике. Его собственные функции называются *шаровыми функциями*, а его собственные значения равны  $n(n+1)$ , где  $n$  — целое число. Таким образом, теория шаровых функций дает другое доказательство того, что собственные значения переменной  $k$  являются целыми кратными  $\hbar$ .

Для собственного состояния переменной  $k$ , соответствующего собственному значению  $n\hbar$  ( $n$  — неотрицательное целое число), волновая функция имеет вид

$$\psi = r^{-1} \chi(r, t) S_n(\theta, \varphi), \quad (66)$$

где  $S_n(\theta, \varphi)$  удовлетворяет

$$k(k+\hbar) S_n(\theta, \varphi) = n(n+1) \hbar^2 S_n(\theta, \varphi), \quad (67)$$

т. е. на основании соотношения (65)  $S_n$  является шаровой функцией  $n$ -го порядка. Множитель  $r^{-1}$  введен в правую часть (66) для удобства. Подставляя (66) в выражение (63), мы получаем следующее уравнение для  $\chi$ :

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{n(n+1)}{r^2} \right) + V \right\} \chi. \quad (68)$$

Если состояние является стационарным, соответствующим значению энергии  $H'$ , то  $\chi$  будет иметь вид

$$\chi(r, t) = \chi_0(r) e^{-iH't/\hbar}$$

и уравнение (68) приводится к следующему:

$$H' \chi_0 = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{n(n+1)}{r^2} \right) + V \right\} \chi_0. \quad (69)$$

Это уравнение может быть использовано для определения уровней энергии  $H'$  рассматриваемой системы. Для каждого решения уравнения (69), относящегося к данному  $n$ , будет  $2n + 1$  независимых состояний, поскольку имеется  $2n + 1$  независимых решений уравнения (67), соответствующих  $2n + 1$  различным значениям проекции момента количества движения на некоторую ось, скажем  $m_z$ .

Вероятность нахождения частицы в элементе объема  $dx dy dz$  пропорциональна  $|\psi|^2 dx dy dz$ . Если  $\psi$  имеет вид (66), то эта вероятность будет  $r^{-2} |\chi|^2 |S_n|^2 dx dy dz$ . Вероятность нахождения частицы в шаровом слое между  $r$  и  $r + dr$  пропорциональна  $|\chi|^2 dr$ . Отсюда ясно, что при решении уравнений (68) или (69) нужно наложить краевое условие на  $\chi$  при  $r = 0$ . Именно, функция  $\chi$  должна быть такая, чтобы интеграл  $\int_0 |\chi|^2 dr$  сходилс

сходилс на нижнем пределе. Если бы этот интеграл расходился, волновая функция представляла бы состояние, в котором вероятность нахождения частицы в начале координат была бы бесконечной. Такое состояние является физически недопустимым.

Краевое условие при  $r = 0$ , полученное выше при рассмотрении вероятности, однако, недостаточно жесткое (т. е. недостаточно ограничивает вид функции). Мы получим более жесткое условие, проверяя, что волновая функция, полученная при решении волнового уравнения в сферических координатах (63), действительно удовлетворяет волновому уравнению в декартовых координатах (61).



Рассмотрим случай  $V = 0$ , соответствующий задаче о движении свободной частицы. В стационарном состоянии с энергией  $H' = 0$  уравнение (61) дает

$$\nabla^2 \psi = 0, \quad (70)$$

где  $\nabla^2$  — оператор Лапласа  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , а из уравнения (63) следует

$$\left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2 r^2} \right) \psi = 0. \quad (71)$$

Одним из решений уравнения (71) для  $k = 0$  является  $\psi = r^{-1}$ . Оно не удовлетворяет уравнению (70), так как хотя  $\nabla^2 r^{-1}$  исчезает для любого конечного  $r$ , интеграл от  $\nabla^2 r^{-1}$  по объему, содержащему начало координат, равен  $-4\pi$ . (Это можно доказать, преобразуя объемный интеграл в поверхностный с помощью теоремы Гаусса.) Следовательно,

$$\nabla^2 r^{-1} = -4\pi \delta(x) \delta(y) \delta(z). \quad (72)$$

Таким образом, не всякое решение уравнения (71) является решением уравнения (70). Обобщая этот результат, можно сказать, что не всякое решение уравнения (63) есть решение уравнения (61). Мы должны наложить на решение уравнения (63) условие, чтобы оно не стремилось к бесконечности при  $r \rightarrow 0$ , как  $r^{-1}$ , для того чтобы при подстановке его в (61) не получилось дельта-функции в правой части аналогично уравнению (72). Только если уравнение (63) дополнено этим условием, оно становится эквивалентным уравнению (61). Таким образом, мы получаем условие  $r\psi \rightarrow 0$  или  $\chi \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$ .

Имеются также краевые условия для волновой функции при  $r = \infty$ . Если нас интересуют только «связанные» состояния, т. е. состояния, в которых частица не уходит в бесконечность, мы должны потребовать, чтобы интеграл

$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr$  сходил на верхнем пределе. Эти связанные состояния не являются, однако, единственными допустимыми физически. Могут быть также состояния, когда частица приходит из бесконечности, рассеивается центральным силовым полем и уходит опять в бесконечность. Для этих состояний волновая функция может оставаться конечной при  $r \rightarrow \infty$ .

Такие состояния будут рассматриваться в гл. VIII, посвященной задачам столкновения. Во всяком случае, волновая функция не должна стремиться к бесконечности при  $r \rightarrow \infty$ , иначе она будет описывать состояние, не имеющее физического смысла.

### § 39. Уровни энергии атома водорода

Приведенное выше рассмотрение может быть применено к задаче об атоме водорода, если пренебречь релятивистской механикой и спином электрона. Потенциальная энергия \*) будет теперь равна  $-\frac{e^2}{r}$ , так что уравнение (69) примет вид

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{n(n+1)}{r^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \right\} \chi_0 = -\frac{2mH'}{\hbar^2} \chi_0. \quad (73)$$

Полное исследование уравнения проведено Шредингером \*\*). Мы получим здесь собственные значения  $H'$  уравнения (73) элементарным путем.

Удобно положить

$$\chi_0(r) = f(r) e^{-r/a}, \quad (74)$$

введя таким образом новую функцию  $f(r)$ ; величина  $a$  равна одному из двух значений квадратного корня

$$a = \pm \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m} H'}. \quad (75)$$

Уравнение (73) принимает вид

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{a} \frac{d}{dr} - \frac{n(n+1)}{r^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \right\} f(r) = 0. \quad (76)$$

Мы ищем решение этого уравнения в виде степенного ряда

$$f(r) = \sum_s c_s r^s, \quad (77)$$

в котором последовательные значения  $s$  отличаются на единицу, хотя сами по себе они не обязаны быть целыми.

\*) Букву  $e$ , обозначающую здесь величину заряда электрона, не следует смешивать с основанием экспоненциальной функции.

\*\*) Schrödinger, Ann. d. Physik, 1926, Bd. 79, S. 361.

Подставляя ряд (77) в уравнение (76), получаем

$$\sum_s c_s \left\{ s(s-1) r^{s-2} - \left( 2 \frac{s}{a} \right) r^{s-1} - (n+1) n r^{s-2} + \right. \\ \left. + \left( \frac{2me^2}{\hbar^2} \right) r^{s-1} \right\} = 0,$$

что дает, после перегруппировки членов и приравнивания нулю коэффициента при  $r^{s-2}$ , следующее соотношение между последовательными величинами  $c_s$ :

$$c_s [s(s-1) - n(n+1)] = c_{s-1} \left[ 2 \frac{s-1}{a} - \frac{2me^2}{\hbar^2} \right]. \quad (78)$$

Мы видели в предыдущем параграфе, что допустимы только такие собственные функции  $\chi$ , которые стремятся к нулю при  $r \rightarrow 0$ , и согласно выражению (74),  $f(r)$  должно стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$ . Ряд (77) должен, следовательно, обрываться со стороны малых  $s$  на некотором минимальном числе, большем нуля. Единственно возможными минимальными значениями  $s$  являются такие, при которых в соотношении (78) исчезает коэффициент при  $c_s$ . Такими значениями будут  $n+1$  и  $-n$ , но во втором случае число  $s$  отрицательное или нуль. Значит, минимальное значение  $s$  должно быть  $n+1$ . Так как  $n$  всегда целое число, то и все значения  $s$  будут целыми.

Ряд (77), вообще говоря, простирается до бесконечности со стороны больших  $s$ . Согласно уравнению (78) для больших  $s$  отношение последовательных членов равно

$$\frac{c_s}{c_{s-1}} r = \frac{2r}{sa}.$$

Следовательно, ряд (77) всегда сходится, так как отношения далеких членов друг к другу такие же, как в ряде

$$\sum_s \frac{1}{s!} \left( \frac{2r}{a} \right)^s, \quad (79)$$

который сходится к  $e^{2r/a}$ .

Мы должны теперь исследовать поведение  $\chi_0$  при больших  $r$ . Следует различать два случая: когда  $H'$  положительно и когда оно отрицательно. Для отрицательных  $H'$  величина  $a$ , определяемая из выражения (75), будет вещественной. Допустим, что квадратный корень в  $a$  берется с положитель-

ным знаком. Тогда при  $r \rightarrow \infty$  сумма ряда (77) будет стремиться к бесконечности по тому же закону, что и сумма ряда (79), т. е. как  $e^{2r/a}$ . Как видно из (74), величина  $\chi_0$  будет поэтому стремиться к бесконечности по закону  $e^{r/a}$ , и не будет описывать какое-либо физически возможное состояние. Поэтому для отрицательных  $H'$ , вообще говоря, допустимого решения уравнения (73) не существует.

Исключением будет случай, когда ряд (77) обрывается со стороны больших  $s$ . В этом случае все краевые условия удовлетворяются. Условие, при котором ряд обрывается, состоит в том, что коэффициент при  $c_{s-1}$  в выражении (78) обращается в нуль при некотором значении индекса  $s - 1$  не меньшем, чем его минимальное значение  $n + 1$ . Это условие равносильно равенству

$$\frac{s}{a} - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$$

для некоторого целого  $s$ , величина которого не меньше чем  $n + 1$ . С учетом выражения (75) это условие принимает вид

$$H' = -\frac{me^4}{2s^2\hbar^2} \quad (80)$$

и дает значения уровней энергии. Так как  $s$  может быть любым положительным числом, формула (80) дает дискретную совокупность отрицательных уровней энергии атома водорода. Они находятся в соответствии с экспериментом. Для каждого из них (за исключением наинизшего состояния  $s = 1$ ) имеется несколько независимых состояний, так как имеются различные возможные значения  $n$ , именно, любое целое положительное число, меньше  $s$  или нуль. Та кратность состояний, соответствующих одному уровню энергии, о которой здесь идет речь, имеет место сверх упомянутой в предыдущем параграфе кратности состояний, возникающей благодаря различным возможным значениям проекции момента количества движения, и имеющей место в любом центральном поле. Дополнительная кратность состояний с данной энергией получается лишь в кулоновском поле, но даже и в этом случае она исчезает, как показано в гл. XI, если учесть релятивистскую механику. Решение  $\chi_0$  уравнения (73) при  $H'$ , удовлетворяющем соотношению (80), стремится к нулю экспоненциально при  $r \rightarrow \infty$ , и представляет связанное состояние (соответствующее эллиптическим орбитам теории Бора).

Для любого положительного значения  $H'$  величина  $a$ , даваемая формулой (75), будет чисто-мнимой. Ряд (77), который при больших  $r$  ведет себя как ряд (79), будет иметь сумму, остающуюся конечной при  $r \rightarrow \infty$ . Значит, величина  $\chi_0$ , определяемая формулой (74), будет конечной при  $r \rightarrow \infty$ , и будет поэтому допустимым решением уравнения (73). Это решение дает волновую функцию  $\psi$ , убывающую при  $r \rightarrow \infty$  как  $r^{-1}$ . Следовательно, в дополнение к дискретной совокупности отрицательных уровней энергии (80), возможны также все уровни с положительной энергией. Состояния с положительной энергией не являются связанными, так как для них интеграл  $\int_0^{\infty} |\chi_0|^2 dr$  расходится на верхнем пределе (эти состояния соответствуют гиперболическим орбитам в теории Бора).

### § 40. Правила отбора

Если динамическая система приведена в некоторое стационарное состояние, то она будет оставаться в этом состоянии до тех пор, пока на нее не действует некоторая внешняя сила. Однако практически любая атомная система часто подвергается воздействию внешнего электромагнитного поля, вследствие чего становится возможным переход из одного стационарного состояния в другое. Теория таких переходов будет развита в §§ 44 и 45. Как вытекает из этой теории, можно с большой степенью точности утверждать, что переходы между двумя состояниями под действием электромагнитного поля не могут происходить, если в гейзенберговском представлении, в котором два рассматриваемых состояния выбираются в качестве базисных, соответствующий матричный элемент вектора дипольного момента  $\mathbf{D}$  исчезает. Для многих атомных систем оказывается, что громадное большинство матричных элементов  $\mathbf{D}$  в гейзенберговском представлении в самом деле обращается в нуль, и следовательно, имеются сильные ограничения на возможности переходов. Правила, выражающие эти ограничения, называются *правилами отбора*.

Представление о правилах отбора может быть уточнено путем более детального применения теории §§ 44 и 45, согласно которой матричные элементы различных компонент  $\mathbf{D}$  в декартовых координатах соответствуют различным

состояниям поляризации электромагнитного излучения. Это соответствие как раз такого рода, какого следовало бы ожидать, если рассматривать матричные элементы, точнее их вещественные части, как амплитуды гармонических осцилляторов, взаимодействующих с электромагнитным полем согласно классической электродинамике.

Имеется общий метод получения всех правил отбора. Обозначим интегралы движения, являющиеся диагональными в гейзенберговском представлении, через  $\alpha$ , и пусть  $D$  — одна из компонент  $\mathbf{D}$  в декартовых координатах. Мы должны получить алгебраическое уравнение, связывающее  $D$  и  $\alpha$ , которое не содержало бы других динамических переменных, кроме  $D$  и  $\alpha$ , и являлось линейным \*) относительно  $D$ . Такое уравнение будет иметь вид

$$\sum_r f_r D g_r = 0, \quad (81)$$

где величины  $f$  и  $g$  — функции только от  $\alpha$ . Если это уравнение выразить через представители, то получится

$$\sum_r f_r(\alpha') \langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle g_r(\alpha'') = 0$$

или, иначе,

$$\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle \sum_r f_r(\alpha') g_r(\alpha'') = 0,$$

откуда видно, что

$$\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle = 0,$$

если только не выполняется соотношение

$$\sum_r f_r(\alpha') g_r(\alpha'') = 0. \quad (82)$$

Поскольку последнее уравнение дает связь между  $\alpha'$  и  $\alpha''$ , которая должна существовать, чтобы  $\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle$  могло не обращаться в нуль, это уравнение и представляет правило отбора для компоненты  $D$  величины  $\mathbf{D}$ .

Рассмотрение гармонического осциллятора в § 34 дает пример правила отбора. Уравнение (8) имеет тот же вид, что и (81), причем  $\eta$  стоит вместо  $D$  и  $H$  играет роль  $\alpha$ . Оно показывает, что все матричные элементы  $\langle H' | \eta | H'' \rangle$  исчезают, за исключением тех, для которых  $H'' - H' = \hbar\omega$ .

---

\*) И однородным. (Прим. В. А. Фока),

Так как оператор  $q$  пропорционален  $\eta - \bar{\eta}$ , то все его матричные элементы  $\langle H' | q | H'' \rangle$  исчезают, за исключением тех, для которых  $H'' - H' = \pm \hbar \omega$ . Если гармонический осциллятор несет электрический заряд, то его дипольный момент  $D$  пропорционален  $q$ . Таким образом, правило отбора здесь состоит в том, что возможны лишь те переходы, при которых  $H$  меняется только на один квант  $\hbar \omega$ .

Получим теперь правила отбора для операторов  $m_z$  и  $k$  в задаче об электроном, движущемся в центральном поле. Компоненты дипольного момента здесь пропорциональны декартовым координатам  $x, y, z$ . Рассматривая сначала  $m_z$ , мы имеем, что  $m_z$  коммутирует с  $z$ , т. е. что

$$m_z z - z m_z = 0.$$

Это — уравнение требуемого типа (81), дающее правило отбора

$$m'_z - m''_z = 0$$

для компоненты дипольного момента по оси  $z$ . Далее, из уравнений (23) мы имеем

$$[m_z, [m_z, x]] = [m_z, y] = -x$$

или

$$m_z^2 x - 2m_z x m_z + x m_z^2 - \hbar^2 x = 0,$$

что также имеет вид (81) и дает правило отбора

$$m_z'^2 - 2m_z' m_z'' + m_z''^2 - \hbar^2 = 0$$

или

$$(m_z' - m_z'' - \hbar)(m_z' - m_z'' + \hbar) = 0$$

для компоненты дипольного момента по оси  $x$ . Правило отбора для компоненты по оси  $y$  такое же самое. Таким образом, наши правила отбора для  $m_z$  состоят в том, что при переходе, связанном с излучением, поляризация которого соответствует диполю, ориентированному по оси  $z$ , величина  $m_z'$  не может меняться, тогда как при переходах, для которых поляризация соответствует ориентации диполя по оси  $x$  или  $y$ , величина  $m_z'$  должна меняться на  $\pm \hbar$ .

Состояние поляризации излучения, связанного с переходом, для которого  $m_z'$  меняется на  $\pm \hbar$ , мы можем определить более точно, рассматривая условия, при которых не исчезают матричные элементы  $x + iy$  и  $x - iy$ .

Имеем

$$[m_z, (x + iy)] = y - ix = -i(x + iy)$$

или

$$m_z(x + iy) - (x + iy)(m_z + \hbar) = 0,$$

что опять имеет вид (81). Отсюда получаем

$$m'_z - m''_z - \hbar = 0$$

как условие того, что величина  $\langle m'_z | x + iy | m''_z \rangle$  не обязана равняться нулю. Аналогично

$$m'_z - m''_z + \hbar = 0$$

есть условие того, что величина  $\langle m'_z | x - iy | m''_z \rangle$  не обязана равняться нулю. Следовательно, имеем

$$\langle m'_z | x - iy | m'_z - \hbar \rangle = 0,$$

и мы можем положить

$$\langle m'_z | x | m'_z - \hbar \rangle = i \langle m'_z | y | m'_z - \hbar \rangle = (a + ib) e^{i\omega t},$$

где  $a$ ,  $b$  и  $\omega$  вещественны. Выражение, комплексно-сопряженное этому, будет

$$\langle m'_z - \hbar | x | m'_z \rangle = -i \langle m'_z - \hbar | y | m'_z \rangle = (a - ib) e^{-i\omega t}.$$

Состояние поляризации излучения, связанного с переходом, в котором  $m''_z = m'_z - \hbar$ , определяется вектором

$$\frac{1}{2} \{ \langle m'_z | \mathbf{D} | m'_z - \hbar \rangle + \langle m'_z - \hbar | \mathbf{D} | m'_z \rangle \}.$$

Этот вектор имеет следующие три компоненты:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} \{ \langle m'_z | x | m'_z - \hbar \rangle + \langle m'_z - \hbar | x | m'_z \rangle \} &= \\ &= \frac{1}{2} \{ (a + ib) e^{i\omega t} + (a - ib) e^{-i\omega t} \} = a \cos \omega t - b \sin \omega t, \\ \frac{1}{2} \{ \langle m'_z | y | m'_z - \hbar \rangle + \langle m'_z - \hbar | y | m'_z \rangle \} &= \\ &= \frac{1}{2} i \{ - (a + ib) e^{i\omega t} + (a - ib) e^{-i\omega t} \} = a \sin \omega t + b \cos \omega t, \\ \frac{1}{2} \{ \langle m'_z | z | m'_z - \hbar \rangle + \langle m'_z - \hbar | z | m'_z \rangle \} &= 0. \end{aligned} \right\}$$



Отсюда видно, что излучение, распространяющееся в направлении оси  $z$ , является поляризованным по кругу; излучение, распространяющееся в любом направлении в плоскости  $xy$ , будет линейно поляризованным в этой плоскости; излучение, распространяющееся в промежуточном направлении, будет эллиптически поляризованным. Направление круговой поляризации для излучения, распространяющегося вдоль оси  $z$ , зависит от того, положительна или отрицательна величина  $\omega$ , что в свою очередь зависит от того, какое из состояний  $m'_z$  или  $m''_z = m'_z - \hbar$  имеет большую энергию.

Определим теперь правила отбора для  $k$ . Имеем

$$[k(k+\hbar), z] = [m_x^2, z] + [m_y^2, z] = -ym_x - m_{xy} + xm_y + m_{yx} = \\ = 2(m_{yx} - m_{xy} + i\hbar z) = 2(m_yx - ym_x) = 2(xm_y - m_{xy}).$$

Аналогично

$$[k(k+\hbar), x] = 2(ym_z - m_{yz})$$

и

$$[k(k+\hbar), y] = 2(m_xz - xm_z).$$

Следовательно,

$$[k(k+\hbar), [k(k+\hbar), z]] = 2[k(k+\hbar), (m_yx - m_{xy} + i\hbar z)] = \\ = 2m_y[k(k+\hbar), x] - 2m_x[k(k+\hbar), y] + 2i\hbar[k(k+\hbar), z] = \\ = 4m_y(ym_z - m_{yz}) - 4m_x(m_xz - xm_z) + \\ + 2\{k(k+\hbar)z - zk(k+\hbar)\} = \\ = 4(m_xx + m_yy + m_zz)m_z - 4(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)z + \\ + 2\{k(k+\hbar)z - zk(k+\hbar)\}.$$

Из соотношения (22) имеем

$$m_xx + m_yy + m_zz = 0 \quad (84)$$

и, следовательно,

$$[k(k+\hbar), [k(k+\hbar), z]] = -2\{k(k+\hbar)z + zk(k+\hbar)\},$$

откуда вытекает

$$k^2(k+\hbar)^2z - 2k(k+\hbar)zk(k+\hbar) + zk^2(k+\hbar)^2 - \\ - 2\hbar^2\{k(k+\hbar)z + zk(k+\hbar)\} = 0. \quad (85)$$

Аналогичные уравнения справедливы для  $x$  и  $y$ . Эти уравнения имеют требуемый вид (81) и дают нам правило отбора

$$k'^2(k'+\hbar)^2 - 2k'(k'+\hbar)k''(k''+\hbar) + k''^2(k''+\hbar)^2 - \\ - 2\hbar^2k'(k'+\hbar) - 2\hbar^2k''(k''+\hbar) = 0,$$

которое приводится к

$$(k' + k'' + 2\hbar)(k' + k'')(k' - k'' + \hbar)(k' - k'' - \hbar) = 0.$$

Переход между двумя состояниями  $k'$  и  $k''$  может иметь место, только если один из четырех множителей обращается в нуль.

Первый из этих множителей  $(k' + k'' + 2\hbar)$  никогда не обращается в нуль, так как все собственные значения  $k$  положительны или равны нулю. Второй множитель  $(k' + k'')$  может обратиться в нуль, только если  $k' = 0$  и  $k'' = 0$ . Но переход между двумя состояниями с этими значениями  $k$  не может происходить из-за других правил отбора. Это можно видеть из следующих соображений. Если два состояния (обозначаемые штрихом и двумя штрихами) таковы, что  $k' = 0$  и  $k'' = 0$ , то из неравенства (41) и соответствующих результатов для  $m_x$  и  $m_y$  вытекает  $m'_x = m'_y = m'_z = 0$  и  $m''_x = m''_y = m''_z = 0$ . Но правило отбора для  $m_z$  показывает, что матричные элементы  $x$  и  $y$ , относящиеся к этим двум состояниям, должны исчезать, поскольку величина  $m_z$  не меняется при переходе. Аналогично правила отбора для  $m_x$  и  $m_y$  показывают, что матричный элемент  $z$  также исчезает. Итак, переходы между этими двумя состояниями не могут происходить. Наше правило отбора для  $k$  сводится к

$$(k' - k'' + \hbar)(k' - k'' - \hbar) = 0,$$

откуда видно, что  $k$  должно меняться на  $\pm\hbar$ .

Это правило отбора может быть записано в виде

$$k'^2 - 2k'k'' + k''^2 - \hbar^2 = 0,$$

и так как это есть условие того, что матричный элемент  $\langle k' | z | k'' \rangle$  не обязан равняться нулю, мы получаем уравнение

$$k^2 z - 2kzk + zk^2 - \hbar^2 z = 0$$

или

$$[k, [k, z]] = -z. \quad (86)$$

Этот результат едва ли может быть получен более прямым путем.

В качестве заключительного примера мы получим правило отбора для величины  $K$  полного момента количества движения  $M$  атомной системы общего вида. Пусть  $x$ ,  $y$ ,  $z$  будут координаты одного из электронов. Мы должны по-

лучить условие того, что матричный элемент величин  $x$ ,  $y$  или  $z$  с индексами  $k'$  и  $k''$  не обязан равняться нулю. Это, очевидно, то же самое, что и необходимое условие неравенства нулю матричного элемента с индексами  $k'$  и  $k''$  для величин  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  или  $\lambda_3$ ; где  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  — любые три независимые линейные функции  $x$ ,  $y$  и  $z$  с числовыми коэффициентами. Это условие может быть заменено более общим, когда вместо численных коэффициентов упомянутые линейные функции могут иметь любые коэффициенты, коммутирующие с  $K$ , а значит, и представимые матрицами, диагональными относительно  $K$ .

Пусть

$$\lambda_0 = M_x x + M_y y + M_z z,$$

$$\lambda_x = M_y z - M_z y - i\hbar x,$$

$$\lambda_y = M_z x - M_x z - i\hbar y,$$

$$\lambda_z = M_x y - M_y x - i\hbar z.$$

Мы имеем, учитывая (29),

$$\begin{aligned} M_x \lambda_x + M_y \lambda_y + M_z \lambda_z &= \sum_{xyz} (M_x M_y z - M_x M_z y - i\hbar M_{xx}) = \\ &= \sum_{xyz} (M_x M_y - M_y M_x - \hbar M_z) z = 0. \end{aligned} \quad (87)$$

Таким образом,  $\lambda_x$ ,  $\lambda_y$ ,  $\lambda_z$  не являются линейно независимыми функциями  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Однако, любые две из них, вместе с  $\lambda_0$ , образуют три линейно независимые функции и могут быть взяты в качестве  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ , поскольку все коэффициенты  $M_x$ ,  $M_y$  и  $M_z$  коммутируют с  $K$ . Наша задача, таким образом, сводится к отысканию условия, при котором матричные элементы величин  $\lambda_0$ ,  $\lambda_x$ ,  $\lambda_y$ ,  $\lambda_z$  с индексами  $K'$  и  $K''$  могут не обращаться в нуль. Физический смысл этих величин  $\lambda$  состоит в том, что  $\lambda_0$  пропорционально проекции вектора  $(x, y, z)$  на направление  $\mathbf{M}$ , а  $\lambda_x$ ,  $\lambda_y$ ,  $\lambda_z$  пропорциональны декартовым компонентам проекции  $(x, y, z)$  на направление, перпендикулярное к  $\mathbf{M}$ .

Так как  $\lambda_0$  — скаляр, то он должен коммутировать с  $K$ . Отсюда следует, что только диагональные матричные элементы  $\langle K' | \lambda_0 | K' \rangle$  величины  $\lambda_0$  могут отличаться от нуля. Таким образом, для величины  $K$  правило отбора по

индексу  $\lambda_0$  состоит в том, что  $K$  не меняется. Применяя соотношения (30) к вектору  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ , имеем

$$[M_z, \lambda_x] = \lambda_y, \quad [M_z, \lambda_y] = -\lambda_x, \quad [M_z, \lambda_z] = 0.$$

Эти соотношения между  $M_z$  и  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  имеют в точности тот же вид, что и соотношения (23), (24) между  $m_z$  и  $x, y, z$ . Кроме того, соотношение (87) имеет тот же вид, что и (84). Таким образом, динамические переменные  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  имеют по отношению к моменту количества движения  $M$  такие же свойства, как и  $x, y, z$  по отношению к  $m$ . Поэтому можно перенести вывод правила отбора по индексу  $k$ , проведенный для случая, когда дипольный момент пропорционален  $x, y, z$  на правило отбора по  $K$  для случая, когда дипольный момент пропорционален  $(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$ . Мы находим таким путем, что по отношению к  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  правило отбора состоит в том, что  $K$  должно меняться на  $\pm \hbar$ .

Собирая вместе результаты, мы получаем в качестве правила отбора для  $K$ , что оно должно меняться на 0 или  $\pm \hbar$ . Мы рассматривали дипольный момент, происходящий от одного из электронов, но такое же правило отбора должно выполняться для каждого электрона, и следовательно, также для суммарного дипольного момента.

#### § 41. Явление Зеемана для атома водорода

Рассмотрим атом водорода в однородном магнитном поле. Оператор Гамильтона (57) с  $V = -\frac{e^2}{r}$ , описывающий атом водорода в отсутствие внешнего поля, видоизменяется магнитным полем, причем, согласно классической механике, видоизменение состоит в замене  $p_x, p_y, p_z$  на  $\left(p_x + \frac{e}{c} A_x\right), \left(p_y + \frac{e}{c} A_y\right), \left(p_z + \frac{e}{c} A_z\right)$ , где  $A_x, A_y, A_z$  — компоненты вектор-потенциала, описывающего поле. Для однородного поля величины  $\mathcal{H}$ , направленного по оси  $z$ , мы можем взять

$$A_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H} y, \quad A_y = \frac{1}{2} \mathcal{H} x, \quad A_z = 0.$$

Классическая функция Гамильтона будет тогда иметь вид

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left( p_x - \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H} y \right)^2 + \left( p_y + \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H} x \right)^2 + p_z^2 \right\} - \frac{e^2}{r}.$$

индексу  $\lambda_0$  состоит в том, что  $K$  не меняется. Применяя соотношения (30) к вектору  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ , имеем

$$[M_z, \lambda_x] = \lambda_y, \quad [M_z, \lambda_y] = -\lambda_x, \quad [M_z, \lambda_z] = 0.$$

Эти соотношения между  $M_z$  и  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  имеют в точности тот же вид, что и соотношения (23), (24) между  $m_z$  и  $x, y, z$ . Кроме того, соотношение (87) имеет тот же вид, что и (84). Таким образом, динамические переменные  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  имеют по отношению к моменту количества движения  $M$  такие же свойства, как и  $x, y, z$  по отношению к  $m$ . Поэтому можно перенести вывод правила отбора по индексу  $k$ , проведенный для случая, когда дипольный момент пропорционален  $x, y, z$  на правило отбора по  $K$  для случая, когда дипольный момент пропорционален  $(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$ . Мы находим таким путем, что по отношению к  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  правило отбора состоит в том, что  $K$  должно меняться на  $\pm \hbar$ .

Собирая вместе результаты, мы получаем в качестве правила отбора для  $K$ , что оно должно меняться на 0 или  $\pm \hbar$ . Мы рассматривали дипольный момент, происходящий от одного из электронов, но такое же правило отбора должно выполняться для каждого электрона, и следовательно, также для суммарного дипольного момента.

#### § 41. Явление Зеемана для атома водорода

Рассмотрим атом водорода в однородном магнитном поле. Оператор Гамильтона (57) с  $V = -\frac{e^2}{r}$ , описывающий атом водорода в отсутствие внешнего поля, видоизменяется магнитным полем, причем, согласно классической механике, видоизменение состоит в замене  $p_x, p_y, p_z$  на  $\left(p_x + \frac{e}{c} A_x\right), \left(p_y + \frac{e}{c} A_y\right), \left(p_z + \frac{e}{c} A_z\right)$ , где  $A_x, A_y, A_z$  — компоненты вектор-потенциала, описывающего поле. Для однородного поля величины  $\mathcal{H}$ , направленного по оси  $z$ , мы можем взять

$$A_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H} y, \quad A_y = \frac{1}{2} \mathcal{H} x, \quad A_z = 0.$$

Классическая функция Гамильтона будет тогда иметь вид

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left( p_x - \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H} y \right)^2 + \left( p_y + \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H} x \right)^2 + p_z^2 \right\} - \frac{e^2}{r}.$$

те стационарные состояния системы без поля, для которых  $m_z$  имеет численное значение  $m'_z$ , кратное  $\hbar$  и для которых также  $\sigma_z$  имеет численное значение  $\sigma'_z$ , то эти стационарные состояния останутся стационарными состояниями также и при наличии поля. Добавка к энергии будет складываться из двух частей: часть  $\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc} m'_z$  возникает вследствие орбитального движения, и ее можно рассматривать как происходящую от орбитального магнитного момента,  $-\frac{em'_z}{2mc}$ , тогда как часть  $\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc} \hbar\sigma'_z$  происходит от спина. Отношение орбитального магнитного момента к орбитальному механическому моменту  $m'_z$  равно  $-\frac{e}{2mc}$ , что вдвое меньше отношения спинового магнитного момента к спиновому механическому моменту. Этот факт иногда называют магнитной аномалией спина.

Так как уровни энергии теперь содержат  $m_z$ , то правила отбора для  $m_z$ , полученные в предыдущем параграфе, становятся доступными непосредственной экспериментальной проверке. Введем гейзенберговское представление, в котором  $m_z$  и  $\sigma_z$  диагональны, как и другие интегралы движения. Правило отбора для  $m_z$  требует изменения  $m_z$  на  $\hbar$ , 0 или  $-\hbar$ , тогда как  $\sigma_z$  не будет вообще меняться, поскольку  $\sigma_z$  коммутирует с дипольным моментом. Значит, разность энергий двух состояний, участвующих в процессе перехода, будет отличаться от своего значения при отсутствии поля на величину  $\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc}$ , 0 или  $-\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc}$ . Согласно условию частот Бора отсюда следует, что частоты соответствующего электромагнитного излучения будут отличаться на  $\frac{e\mathcal{H}}{4\pi mc}$ , 0 или  $-\frac{e\mathcal{H}}{4\pi mc}$  от частот в отсутствие магнитного поля. Это означает, что каждая спектральная линия расщепляется под действием магнитного поля на три компоненты. Если рассматривать излучение, распространяющееся вдоль оси  $z$ , то, как следует из формул (83), две боковые компоненты будут поляризованы по кругу, тогда как центральная несмещенная компонента будет иметь интенсивность, равную нулю. Эти результаты согласуются с опытом, а также с классической теорией явления Зеемана.

## ГЛАВА VII

### ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

#### § 42. Общие замечания

В предыдущей главе было проведено точное рассмотрение некоторых простейших систем в квантовой теории. Большая часть квантовых задач, однако, не может быть решена современными средствами математики, так как эти задачи приводят к уравнениям, решение которых не может быть выражено в конечном виде с помощью обычных функций анализа. Для таких задач часто оказывается применимым метод возмущений. Он состоит в том, что производится разделение оператора Гамильтона на две части, одна из которых должна быть простой, а другая малой. Первую часть можно рассматривать как оператор Гамильтона упрощенной или невозмущенной системы, поддающейся точному исследованию, а добавление второй части тогда потребует малых поправок, имеющих характер возмущения, в решение задачи для невозмущенной системы. Требование, чтобы первая часть была простой, практически означает также, что она не должна содержать явно время. Если вторая часть содержит малый числовой множитель  $\epsilon$ , мы можем получить решение наших уравнений для возмущенной системы в виде ряда по степеням  $\epsilon$ ; в том случае, если ряд сходится, он дает решение задачи с любой желаемой степенью точности. Но даже если ряд не сходится, то часто первое приближение, получаемое с его помощью, оказывается довольно точным.

В теории возмущений имеются два различных метода. В одном из них возмущение рассматривается как причина *изменения состояний движения* невозмущенной системы. В другом мы не рассматриваем изменения состояний невозмущенной системы, но предполагаем, что возмущенная система вместо того, чтобы оставаться постоянно в *одном*

из этих состояний, непрерывно переходит из одного в другое или *совершает переходы* под влиянием возмущения.

Какой из методов следует использовать в каждом частном случае, зависит от характера задачи, подлежащей решению. Первый метод обычно полезен только тогда, когда энергия возмущения (поправка к оператору Гамильтона невозмущенной системы) не содержит в явном виде время, и поэтому применяется к стационарным состояниям. Он может быть использован для расчета таких величин, которые не относятся к какому-либо определенному моменту времени, как, например, уровни стационарных состояний возмущенной системы, или в случае задач о столкновениях вероятность рассеяния на данный угол. Второй метод должен, напротив, применяться для решения всех задач, где встречается время, например таких, как явления перехода при внезапном наложении возмущения, или в более общих задачах, где возмущение изменяется со временем произвольным образом (т. е. энергия возмущения содержит время явно). Кроме того, второй метод должен также применяться в некоторых задачах о столкновениях, несмотря на то, что энергия возмущения здесь не зависит явно от времени, а именно в тех задачах, где нужно рассчитывать вероятность испускания или поглощения; эти вероятности, в отличие от вероятности рассеяния, не могут быть определены безотносительно к условиям, которые меняются с течением времени.

Можно суммировать отличительные черты обоих методов, сказав, что в первом методе сравниваются стационарные состояния возмущенной и невозмущенной системы; во втором же методе берут стационарное состояние невозмущенной системы и изучают его изменение со временем под влиянием возмущения.

### § 43. Изменение уровней энергии, вызываемое возмущением

Первый из вышеупомянутых методов мы теперь применим к расчету изменения уровней энергии системы, вызываемого возмущением. Предполагаем, что энергия возмущения, так же как и оператор Гамильтона невозмущенной системы, не содержит времени явно. Наша задача имеет смысл, разумеется, только при том условии, что уровни энергии невозмущенной системы являются дискретными и



разность между ними велика по сравнению с их изменением, вызванным возмущением. Необходимость учитывать это обстоятельство приводит к тому, что имеются некоторые различия в применении первого метода в зависимости от того, являются ли уровни энергии невозмущенной системы дискретными или непрерывными.

Пусть оператор Гамильтона возмущенной системы будет

$$H = E + V, \quad (1)$$

где  $E$  — оператор Гамильтона невозмущенной системы, а  $V$  — малая энергия возмущения. По предположению, каждое собственное значение  $H'$  оператора  $H$  лежит очень близко к одному-единственному собственному значению  $E'$  оператора  $E$ . Мы будем ставить то же самое число штрихов для обозначения некоторого собственного значения  $H$  и собственного значения  $E$ , лежащего близко от него. Таким образом,  $H''$  будет отличаться от  $E''$  на малую величину порядка  $V$ , но будет отличаться от  $E'$  на величину, не являющуюся малой, если только не имеет места равенство  $E' = E''$ . Мы должны все время заботиться о том, чтобы употреблять различное число штрихов для обозначения собственных значений  $H$  и  $E$ , которые не должны лежать близко друг к другу.

Для определения собственных значений  $H$  нужно решить уравнение

$$H |H'\rangle = H' |H'\rangle$$

или

$$(H' - E) |H'\rangle = V |H'\rangle. \quad (2)$$

Пусть  $|0\rangle$  — собственный кет-вектор  $E$ , соответствующий собственному значению  $E'$ . Допустим, что  $|H'\rangle$  и  $H'$ , удовлетворяющие уравнению (2), мало отличаются от вектора  $|0\rangle$  и  $E'$  соответственно и выражаются в виде

$$\left. \begin{aligned} |H'\rangle &= |0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + \dots, \\ H' &= E' + a_1 + a_2 + \dots, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где  $|1\rangle$  и  $a_1$  — первого порядка малости (т. е. того же порядка, что и  $V$ ),  $|2\rangle$  и  $a_2$  — второго и т. д. Подставляя эти выражения в (2), получим

$$\begin{aligned} \{E' - E + a_1 + a_2 + \dots\} \{|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + \dots\} = \\ = V \{|0\rangle + |1\rangle + \dots\}. \end{aligned}$$

Если мы отделим члены нулевого порядка, первого порядка, второго порядка и т. д., то получится следующая система уравнений:

$$\left. \begin{aligned} (E' - E)|0\rangle &= 0, \\ (E' - E)|1\rangle + a_1|0\rangle &= V|0\rangle, \\ (E' - E)|2\rangle + a_1|1\rangle + a_2|0\rangle &= V|1\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Первое из этих уравнений означает то, что было уже предположено, а именно, что  $|0\rangle$  является собственным вектором  $E$ , относящимся к собственному значению  $E'$ . Другие уравнения дают возможность вычислить различные поправки.

Для дальнейшего удобно ввести представление, в котором  $E$  диагонально, т. е. гейзенберговское представление для невозмущенной системы, и взять само  $E$  как одну из наблюдаемых, собственными значениями которой нумеруются представители.

Другие наблюдаемые, если они необходимы, как, например, в случае, когда одному собственному значению  $E$  соответствует более чем одно состояние, обозначим через  $\beta$ . Базисный бра-вектор будет  $\langle E''\beta'' |$ . Так как  $|0\rangle$  — собственный кет-вектор  $E$ , относящийся к собственному значению  $E'$ , то имеем

$$\langle E''\beta'' | 0 \rangle = \delta_{E''E'} f(\beta''), \quad (5)$$

где  $f(\beta'')$  — некоторая функция переменных  $\beta''$ . С помощью этого соотношения второе из уравнений (4), выраженное через представителей, принимает вид

$$(E' - E'') \langle E''\beta'' | 1 \rangle + a_1 \delta_{E''E'} f(\beta'') = \sum_{\beta'} \langle E''\beta'' | V | E'\beta' \rangle f(\beta'). \quad (6)$$

Полагая здесь  $E'' = E'$ , получаем

$$a_1 f(\beta'') = \sum_{\beta'} \langle E'\beta'' | V | E'\beta' \rangle f(\beta'). \quad (7)$$

Уравнение (7) имеет по отношению к переменным  $\beta$  стандартный вид уравнения теории собственных значений. Оно показывает, что различные собственные значения  $a_1$  являются собственными значениями матрицы  $\langle E'\beta'' | V | E'\beta' \rangle$ . Эта матрица есть часть представителя энергии возмущения в гейзенберговском представлении

для невозмущенной системы, именно, часть, состоящая из таких матричных элементов, строки и столбцы которых относятся к одной и той же невозмущенной энергии  $E'$ . Каждое из этих значений  $a_1$  дает в первом приближении уровни энергии возмущенной системы, лежащие близко к уровню энергии невозмущенной системы \*). Итак, в возмущенной системе может быть несколько уравнений энергии, лежащих вблизи одного уровня  $E'$  невозмущенной системы. Их число может быть любым, не превосходящим числа независимых состояний невозмущенной системы, соответствующих уровню энергии  $E'$ . Таким образом, возмущение может вызвать полное или частичное расщепление тех уровней энергии, которые сливаются в значение  $E'$  для невозмущенной системы.

Уравнение (7) также определяет в нулевом приближении представители  $\langle E''\beta'' | 0 \rangle$  стационарных состояний возмущенной системы, соответствующие уровням энергии, лежащим вблизи  $E'$ . Каждое решение  $f(\beta')$  уравнения (7), будучи подставлено в (5), дает один из таких представителей. Каждое из этих стационарных состояний возмущенной системы близко к одному из стационарных состояний невозмущенной системы. Но обратное — что каждое стационарное состояние невозмущенной системы близко к одному из состояний возмущенной системы — неверно, так как общее стационарное состояние невозмущенной системы, соответствующее уровню энергии  $E'$ , имеет представителем правую часть выражения (5) с произвольной функцией  $f(\beta'')$ . Задача определения стационарного состояния возмущенной системы, близкого к стационарному состоянию возмущенной системы, т. е. задача отыскания решения  $f(\beta')$  уравнения (7) соответствует задаче «вековых возмущений» классической механики. Следует отметить, что полученные выше результаты не зависят от величины всех тех матричных элементов энергии возмущения, которые относятся к двум различным уровням энергии невозмущенной системы.

---

\*) Для того чтобы различать эти уровни энергии, необходима более разработанная система обозначений, так как при настоящих обозначениях эти уровни все должны обозначаться одним и тем же числом штрихов — именно таким, как уровень энергии невозмущенной системы, из которого они происходят. Для наших целей, однако, эта более разработанная система обозначений не понадобится.

Посмотрим, что получается в простейшем случае, когда имеется всего одно стационарное состояние невозмущенной системы, относящееся к одному уровню энергии \*). В этом случае переменная  $E$  сама определяет представление и переменную  $\beta$  вводить не нужно.

Сумма (7) сводится к единственному члену, и мы получаем

$$a_1 = \langle E' | V | E' \rangle. \quad (8)$$

Имеется всего один уровень возмущений системы, лежащей вблизи некоторого уровня энергии невозмущенной системы: *изменение в энергии в первом приближении равно соответствующему диагональному элементу энергии возмущения в гейзенберговском представлении для невозмущенной системы, или среднему значению энергии возмущения в соответствующем невозмущенном состоянии*. Последняя формулировка результата та же самая, что и в классической механике, когда невозмущенная система является многократно периодической (условно-периодической).

Перейдем теперь для случая невырожденной системы к расчету поправки второго порядка  $a_2$  к уровню энергии. Уравнение (5) в этом случае, в пренебрежении несущественным числовым множителем, принимает вид

$$\langle E'' | 0 \rangle = \delta_{E''E'},$$

а уравнение (6) принимает вид

$$(E' - E'') \langle E'' | 1 \rangle + a_1 \delta_{E''E'} = \langle E'' | V | E' \rangle.$$

Отсюда получаем величину  $\langle E'' | 1 \rangle$ , когда  $E'' \neq E'$ , именно

$$\langle E'' | 1 \rangle = \frac{\langle E'' | V | E' \rangle}{E' - E''}. \quad (9)$$

Третье из уравнений (4), выраженное через представители, принимает вид

$$\begin{aligned} (E' - E'') \langle E'' | 2 \rangle + a_1 \langle E'' | 1 \rangle + a_2 \delta_{E''E'} = \\ = \sum_{E'''} \langle E'' | V | E''' \rangle \langle E''' | 1 \rangle. \end{aligned}$$

---

\*) Система, в которой каждому уровню энергии принадлежит только одно собственное значение, часто называется *невырожденной*, а система с двумя или более состояниями, принадлежащими одному уровню энергии, называется *вырожденной*, хотя эти термины являются не совсем подходящими с современной точки зрения. (В § 39 автором применен более удачный термин «кратность состояний». (Прим. В. А. Фока))

Полагая здесь  $E'' = E'$ , получим

$$a_1 \langle E' | 1 \rangle + a_2 = \sum_{E''} \langle E' | V | E'' \rangle \langle E'' | 1 \rangle,$$

что с помощью равенства (8) сводится к выражению

$$a_2 = \sum_{E'' \neq E'} \langle E' | V | E'' \rangle \langle E'' | 1 \rangle.$$

Подставляя  $\langle E'' | 1 \rangle$  из (9), мы находим окончательно

$$a_2 = \sum_{E'' \neq E'} \frac{\langle E' | V | E'' \rangle \langle E'' | V | E' \rangle}{E' - E''}.$$

Отсюда получается следующее выражение для полного изменения энергии во втором приближении:

$$a_1 + a_2 = \langle E' | V | E' \rangle + \sum_{E'' \neq E'} \frac{\langle E' | V | E'' \rangle \langle E'' | V | E' \rangle}{E' - E''}. \quad (10)$$

Этот метод может быть распространен, если нужно, на расчет высших приближений. Общие рекуррентные формулы, выражающие поправку  $n$ -го порядка через поправки низших порядков, были получены Борном, Гейзенбергом и Иорданом \*).

#### § 44. Возмущение как причина переходов

Перейдем теперь к рассмотрению второго метода теории возмущений из тех двух, о которых шла речь в § 42. Мы предположим опять, что имеется невозмущенная система, характеризуемая оператором Гамильтона  $E$ , не содержащим время явно, и энергия возмущения  $V$ , которая может быть произвольной функцией времени. Оператор Гамильтона возмущенной системы будет  $H = E + V$ . Для рассматриваемого метода не составляет существенного различия, будет ли спектр энергии невозмущенной системы, т. е. спектр собственных значений  $E$ , дискретным или сплошным. Мы возьмем для определенности случай дискретных состояний. Будем опять работать с гейзенберговским представлением для невозмущенной системы; но поскольку теперь

\*) Z. f. Physik, 1925, Bd. 35, S. 565,

собственные значения  $E$  не будут представлять в качестве значков при нумерации представителей никакого преимущества, мы предположим, что в качестве нумерующих значков используется какая-то совокупность наблюдаемых  $\alpha$ .

Предположим, что в начальный момент времени  $t_0$  система находится в состоянии, когда  $\alpha$  имеют определенные значения  $\alpha'$ . Вектор, соответствующий этому состоянию, есть базисный вектор  $|\alpha'\rangle$ . Если бы не было никакого возмущения, т. е. если бы оператор Гамильтона был  $E$ , это состояние было бы стационарным. Возмущение приводит к изменению состояния. В момент времени  $t$  вектор, соответствующий состоянию в шредингеровской картине, будет  $T|\alpha'\rangle$  согласно уравнению (1) § 27. Вероятность того, что  $\alpha$  будут иметь значения  $\alpha''$ , равна

$$P(\alpha'\alpha'') = |\langle\alpha''|T|\alpha'\rangle|^2. \quad (11)$$

При  $\alpha'' \neq \alpha'$   $P(\alpha'\alpha'')$  представляет собой вероятность перехода из состояния  $\alpha'$  в состояние  $\alpha''$  за промежуток времени  $t_0 \rightarrow t$ , тогда как  $P(\alpha'\alpha')$  — вероятность того, что никакого перехода не произойдет. Сумма  $P(\alpha'\alpha'')$  по всем  $\alpha''$ , очевидно, равна единице.

Допустим теперь, что первоначально система не находилась в одном определенном состоянии  $\alpha'$ , а могла находиться в различных состояниях  $\alpha'$  с вероятностью  $P_{\alpha'}$  для каждого из них. Гиббсовская плотность, соответствующая этому распределению, будет, согласно (68) § 33,

$$\rho = \sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle P_{\alpha'} \langle\alpha'|. \quad (12)$$

К моменту времени  $t$  каждый кет-вектор  $|\alpha'\rangle$  перейдет в  $T|\alpha'\rangle$  и каждый бра-вектор  $\langle\alpha'|$  — в  $\langle\alpha'|T$ , так что  $\rho$  перейдет в

$$\rho_t = \sum_{\alpha'} T|\alpha'\rangle P_{\alpha'} \langle\alpha'|T. \quad (13)$$

Тогда вероятность того, что величины  $\alpha$  будут иметь значения  $\alpha''$ , будет, как вытекает из формулы (73) § 33 и формулы (11), равна

$$\langle\alpha''|\rho_t|\alpha''\rangle = \sum_{\alpha'} \langle\alpha''|T|\alpha'\rangle P_{\alpha'} \langle\alpha'|T|\alpha''\rangle = \sum_{\alpha'} P_{\alpha'} P(\alpha', \alpha''). \quad (14)$$

Этот результат показывает, что вероятность нахождения системы в момент времени  $t$  в состоянии  $\alpha''$  складывается из двух частей. Первая часть равна произведению двух величин: вероятности находиться с самого начала в состоянии  $\alpha''$  и вероятности не сделать никакого перехода; вторая часть есть сумма произведений вероятности находиться вначале в состоянии  $\alpha' \neq \alpha''$  на вероятность сделать отсюда переход в состояние  $\alpha''$ . Таким образом, вероятности различных переходов вносят вклад независимо друг от друга, что согласуется с обычными законами теории вероятностей.

Итак, задача расчета переходов сводится к определению амплитуд вероятности  $\langle \alpha'' | T | \alpha' \rangle$ . Они могут быть получены из дифференциального уравнения (6) § 27 для  $T$

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = HT = (E + V) T. \quad (15)$$

Вычисление можно упростить, если перейти к величине

$$T^* = e^{iE(t-t_0)/\hbar} T. \quad (16)$$

Имеем

$$i\hbar \frac{dT^*}{dt} = e^{iE(t-t_0)/\hbar} \left( -ET + i\hbar \frac{dT}{dt} \right) = e^{iE(t-t_0)/\hbar} VT = V^* T^*, \quad (17)$$

где

$$V^* = e^{iE(t-t_0)/\hbar} V e^{-iE(t-t_0)/\hbar}, \quad (18)$$

т. е.  $V^*$  получается путем применения некоторого унитарного преобразования к  $V$ ).

Уравнение (17) более удобно, чем (15), так как в уравнении (17) изменение  $T^*$  определяется целиком возмущением  $V$ , и при  $V = 0$   $T^*$  будет равно своему первоначальному значению, т. е. единице. Пользуясь (16), получим

$$\langle \alpha'' | T^* | \alpha' \rangle = e^{iE''(t-t_0)/\hbar} \langle \alpha'' | T | \alpha' \rangle,$$

так что

$$P(\alpha' \rightarrow \alpha'') = |\langle \alpha'' | T^* | \alpha' \rangle|^2, \quad (19)$$

откуда видно, что все равно, чем пользоваться для вычисления вероятности перехода: величиной  $T^*$  или величиной  $T$ .

---

\*) Представление, отвечающее  $T^*$  и  $V^*$  получило название *представление взаимодействия*, или представление Дирака. (Прим. ред.)

Наше рассмотрение до сих пор было точным. Мы предположим теперь, что  $V$  есть малая величина первого порядка и представим  $T^*$  в виде

$$T^* = 1 + T_1^* + T_2^* + \dots, \quad (20)$$

где  $T_1^*$  — первого порядка,  $T_2^*$  — второго порядка и т. д. Подставляя выражение (20) в уравнение (17) и приравнявая члены одинакового порядка, получим

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{dT_1^*}{dt} &= V^*, \\ i\hbar \frac{dT_2^*}{dt} &= V^* T_1^*, \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Из первого уравнения имеем

$$T_1^* = -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t V^*(t') dt', \quad (22)$$

из второго

$$T_2^* = -\hbar^{-2} \int_{t_0}^t V^*(t') dt' \int_{t_0}^{t'} V^*(t'') dt'' \quad (23)$$

и т. д.

Для многих практических задач можно получить достаточно точность, сохраняя только член  $T_1^*$ . Это дает для вероятности перехода  $P(\alpha' \alpha'')$  при  $\alpha'' \neq \alpha'$  выражение

$$\begin{aligned} P(\alpha' \alpha'') &= \hbar^{-2} \left| \langle \alpha'' | \int_{t_0}^t V^*(t') dt' | \alpha' \rangle \right|^2 = \\ &= \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle dt' \right|^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Мы получили вероятность перехода с точностью до второго порядка включительно. Результат зависит только от матричного элемента  $\langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle$  величины  $V^*(t')$ , относящегося к двум рассматриваемым состояниям, причем  $t'$  изменяется от  $t_0$  до  $t$ . Так как  $V^*$  вещественна, так же как и  $V$ , то

$$\langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle = \overline{\langle \alpha' | V^*(t') | \alpha'' \rangle},$$

и, следовательно, с точностью до второго порядка включительно

$$P(\alpha' \alpha'') = P(\alpha'' \alpha'). \quad (25)$$



Иногда встречается необходимость рассматривать переходы  $\alpha' \rightarrow \alpha''$  такие, что матричный элемент  $\langle \alpha'' | V^* | \alpha' \rangle$  исчезает или мал по сравнению с другими матричными элементами  $V^*$ . Тогда нужно вести вычисление более точно. Если сохранить только члены  $T_1^*$  и  $T_2^*$ , то получим при  $\alpha'' \neq \alpha'$

$$P(\alpha' \alpha'') = \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle dt' - \right. \\ \left. - i\hbar^{-1} \sum_{\alpha''' \neq \alpha', \alpha''} \int_{t_0}^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha''' \rangle dt' \int_{t_0}^{t'} \langle \alpha''' | V^*(t'') | \alpha' \rangle dt'' \right|^2. \quad (26)$$

Члены с  $\alpha''' = \alpha'$  и  $\alpha''' = \alpha''$  исключены из суммы, так как они малы по сравнению с другими членами из-за малости  $\langle \alpha'' | V^* | \alpha' \rangle$ . Для истолкования результата (26) можно принять, что член

$$\int_{t_0}^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle dt' \quad (27)$$

дает переход непосредственно из  $\alpha'$  и  $\alpha''$ , тогда как член

$$-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha''' \rangle dt' \int_{t_0}^{t'} \langle \alpha''' | V^*(t'') | \alpha' \rangle dt'' \quad (28)$$

дает переход из  $\alpha'$  в  $\alpha'''$ , после которого происходит переход из  $\alpha'''$  в  $\alpha''$ . Состояние  $\alpha'''$  в таком толковании называется *промежуточным состоянием*. Мы должны прибавить член (27) к различным членам (28), соответствующим различным промежуточным состояниям, и образовать квадрат модуля суммы; это означает, что имеется интерференция между различными процессами перехода — непосредственным и через промежуточные состояния — и невозможно придать смысл вероятности для одного из этих процессов самого по себе. Для каждого из этих процессов, однако, имеется амплитуда вероятности. Если продолжить метод возмущений до более высокой степени точности, то получится результат, допускающий аналогичное толкование с помощью более сложных процессов перехода, включающих последовательность промежуточных состояний.

### § 45. Приложение к излучению

В предыдущем параграфе была развита общая теория возмущений атомной системы, в которой энергия возмущения может меняться со временем произвольным образом. Возмущение такого рода может быть практически осуществлено с помощью воздействия электромагнитных волн на систему. Посмотрим, к чему сводится наш результат (24) в этом случае.

Если пренебречь влиянием магнитного поля падающего излучения и если предположить, далее, что длины волн всех монохроматических компонент излучения велики по сравнению с размерами атомной системы, то энергия возмущения будет просто скалярным произведением

$$V = (\mathbf{D}, \mathcal{E}), \quad (29)$$

где  $\mathbf{D}$  — полный электрический дипольный момент системы, а  $\mathcal{E}$  — напряженность электрического поля падающего излучения. Мы будем предполагать, что  $\mathcal{E}$  есть заданная функция времени. Если взять для простоты случай поляризованного падающего излучения с определенным направлением электрического вектора и обозначить через  $D$  проекцию  $\mathbf{D}$  на это направление, то выражение (29) для  $V$  сведется к простому произведению

$$V = D\mathcal{E},$$

где  $\mathcal{E}$  — величина вектора  $\mathcal{E}$ . Так как  $\mathcal{E}$  — число, то матричные элементы  $V$  будут равны

$$\langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle = \langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle \mathcal{E},$$

причем матричный элемент  $\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle$  не зависит от  $t$ . Пользуясь формулой (18), получим

$$\langle \alpha'' | V^*(t) | \alpha' \rangle = \langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle e^{i(E'' - E')(t - t_0)/\hbar} \mathcal{E}(t)$$

и, следовательно, выражение (24) для вероятности перехода принимает вид

$$P(\alpha' \alpha'') = \hbar^{-2} |\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle|^2 \left| \int_{t_0}^t e^{i(E'' - E')(t' - t_0)/\hbar} \mathcal{E}(t') dt' \right|^2. \quad (30)$$

Если падающее излучение разложить в интервале времени от  $t_0$  до  $t$  в интеграл Фурье, то поток энергии через единичную площадку, рассчитанный на единичный интервал

частот вблизи частоты  $\nu$  будет, согласно классической электродинамике,

$$E_{\nu} = \frac{c}{2\pi} \left| \int_{t_0}^t e^{2\pi i \nu (t' - t_0)} \mathfrak{E}(t') dt' \right|^2. \quad (31)$$

Сравнивая это с формулой (30), находим

$$P(\alpha' \alpha'') = 2\pi c^{-1} \hbar^{-2} |\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle|^2 E_{\nu}, \quad (32)$$

где

$$\nu = \frac{|E'' - E'|}{h}. \quad (83)$$

Отсюда видно, прежде всего, что вероятность перехода зависит только от той компоненты Фурье падающего излучения, частота которой  $\nu$  связана с изменением энергии соотношением (33). Это дает нам правило частоты Бора и показывает, как идеи Бора в его теории атома, которая была предтечей квантовой механики, могут быть согласованы с квантовой механикой.

Данная элементарная теория не говорит нам ничего об энергии поля излучения. Разумно предположить, что энергия, поглощаемая атомной системой в процессе перехода, происходит от компоненты излучения, частота которой  $\nu$  дается соотношением (33), а также, что энергия, испускаемая атомной системой, переходит в эту компоненту излучения. Это предположение будет подтверждено более полной теорией излучения, излагаемой в гл. X. Результат (32) следует толковать следующим образом. Если система первоначально находилась в состоянии с более низкой энергией, чем в конце, то величина (32) есть вероятность того, что система поглотит излучение. Если же система вначале находилась в состоянии с более высокой энергией, чем в конце, то величина (32) есть вероятность испускания, индуцированного падающим излучением. Данная теория не объясняет того наблюдаемого факта, что и при отсутствии излучения система, находящаяся в состоянии с большей энергией может излучать спонтанно, переходя в состояние с меньшей энергией. Это также будет объяснено более полной теорией в гл. X.

Заклучение о существовании явления индуцированного испускания было выведено Эйнштейном \*) задолго до открытия квантовой механики из рассмотрения статистичес-

\*) Einstein, Phys. Zeits, 1917, Bd. 18, S. 121.

кого равновесия между атомами и полем излучения абсолютно черного тела, удовлетворяющим закону Планка. Эйнштейн показал, что вероятность перехода для индуцированного излучения должна быть равна вероятности перехода для поглощения (при переходе между той же самой парой состояний) в соответствии с настоящей квантовой теорией, а также вывел соотношение, связывающее эту вероятность перехода с вероятностью перехода для спонтанного излучения, причем это соотношение согласуется с теорией гл. X.

Матричный элемент  $\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle$  в выражении (32) играет роль амплитуды одной из компонент Фурье для величины  $D$  в классической теории взаимодействия многократно периодической системы с излучением. Фактически именно идея замены классических компонент Фурье матричными элементами привела Гейзенберга в 1925 г. к открытию квантовой механики. Гейзенберг предположил, что формулы, описывающие в квантовой теории взаимодействие системы с излучением, могут быть получены из классических формул, если подставить вместо компонент Фурье для электрического дипольного момента системы соответствующие матричные элементы. Если применить это предположение к спонтанному излучению, система, находящаяся в состоянии  $\alpha'$  и имеющая дипольный момент  $D$ , будет спонтанно испускать излучение частоты  $\nu = \frac{E' - E''}{h}$  (где  $E''$  — уровень энергии некоторого состояния  $\alpha''$  более низкий, чем  $E'$ ), причем энергия, испускаемая в единицу времени, равна

$$\frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{c^3} |\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle|^2. \quad (34)$$

Распределение этого излучения по различным направлениям и состояние поляризации для каждого направления будут такими же, как для классического электрического диполя с моментом, равным вещественной части  $\langle \alpha'' | D | \alpha' \rangle$ . Для того чтобы установить связь между количеством излученной в единицу времени энергии и вероятностью перехода, мы должны разделить величину (34) на квант  $h\nu$ ; результат можно толковать как вероятность спонтанного испускания этого кванта в единицу времени с одновременным переходом системы в состояние  $\alpha''$  с более низкой энергией. Эти предположения Гейзенберга подтверждаются настоящей теорией излучения, дополненной теорией спонтанных переходов (см. гл. X).

### § 46. Переходы, вызываемые возмущением, не зависящим от времени

Метод возмущений, развитый в § 44, остается применимым и тогда, когда энергия возмущения  $V$  не содержит времени явно. Поскольку полный оператор Гамильтона  $H$  в этом случае не зависит от времени явно, мы могли бы при желании рассмотреть систему с помощью метода § 43 и найти ее стационарные состояния. Целесообразность этого будет зависеть от того, что мы хотим узнать о системе. Если то, что мы хотим рассчитать, явным образом содержит указание времени, например, если нам нужно вычислить вероятность нахождения системы в определенном состоянии в некоторый момент времени при условии, что она была в определенном состоянии в другой момент времени, то более удобным будет метод § 44.

Посмотрим, что даст выражение (24) для вероятности перехода, если  $V$  не зависит от времени явно, причем для простоты положим  $t_0 = 0$ . Матричный элемент  $\langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle$  теперь не зависит от  $t$ , и согласно соотношению (18) имеем

$$\langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle = \langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle e^{i(E'' - E')t'/\hbar}, \quad (35)$$

откуда, предполагая  $E'' \neq E'$ , находим

$$\int_0^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha' \rangle dt' = \langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle \frac{e^{i(E'' - E')t/\hbar} - 1}{i(E'' - E')/\hbar}.$$

Следовательно, вероятность перехода будет равна

$$P(\alpha' \alpha'') = |\langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle|^2 [e^{i(E'' - E')t/\hbar} - 1][e^{-i(E'' - E')t/\hbar} - 1] \times \\ \times \frac{1}{(E'' - E')^2} = 2 |\langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle|^2 \frac{1 - \cos \frac{(E'' - E')t}{\hbar}}{(E'' - E')^2}. \quad (36)$$

Если  $E''$  существенно отличается от  $E'$ , эта вероятность перехода мала и остается малой для всех  $t$ . Этот результат есть то, что требуется по закону сохранения энергии. Полная энергия  $H$  постоянна, а значит, собственная энергия  $E$  (т. е. энергия за вычетом части  $V$ , вызванной возмущением), будучи приблизительно равной  $H$ , должна быть приблизительно постоянной. Это означает, что если численная величина  $E$  в начальный момент была равна  $E'$ , то в любой более

поздний момент времени  $E$  лишь с малой вероятностью может заметно отличаться от  $E'$ .

С другой стороны, если начальное состояние  $\alpha'$  таково, что существует другое состояние  $\alpha''$ , имеющее ту же самую или почти ту же самую собственную энергию  $E$ , то вероятность перехода в конечное состояние  $\alpha''$  может быть значительной. Физический интерес представляет случай, когда конечные состояния  $\alpha''$  принадлежат непрерывной области, которой соответствует сплошной спектр уровней собственной энергии  $E''$ , включающий значение собственной энергии в начальный момент. Начальное состояние не должно быть одним из тех состояний, которые принадлежат к непрерывной области конечных состояний, а может быть либо отдельным дискретным состоянием, либо одним из состояний другой непрерывной области. Вспоминая правила § 18 для толкования амплитуд вероятности в случае сплошного спектра, мы получим, что вероятность перехода в конечное состояние в малом интервале между  $\alpha''$  и  $\alpha'' + d\alpha''$  будет равно  $P(\alpha'\alpha'') d\alpha''$  (где  $P(\alpha'\alpha'')$  дается выражением (36)), если  $\alpha'$  дискретно и пропорционально этой величине, если  $\alpha'$  непрерывно.

Допустим, что переменные  $\alpha'$ , описывающие конечное состояние, состоят из  $E$  и еще некоторого числа других динамических переменных  $\beta$ , так что мы имеем представление, аналогичное тому, какое было рассмотрено в § 43 для случая вырожденных состояний. (Величины  $\beta$ , однако, не обязательно имеют смысл для начального состояния  $\alpha'$ .) Предположим для определенности, что переменные  $\beta$  имеют только дискретные собственные значения. Полная вероятность перехода в конечное состояние  $\alpha''$ , для которого  $\beta$  имеют значения  $\beta''$ , а  $E$  — любое значение (с большой вероятностью  $E$  будет вблизи начального значения  $E'$ ) равна (или пропорциональна) следующему выражению:

$$\begin{aligned} \int P(\alpha'\alpha'') dE'' = \\ = 2 \int_{-\infty}^{\infty} |\langle E''\beta'' | V | \alpha' \rangle|^2 \left[ 1 - \cos \left\{ (E'' - E') \frac{t}{\hbar} \right\} \right] \frac{dE''}{(E'' - E')^2} = \\ = 2t\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} |\langle E' + \frac{\hbar x}{t}, \beta'' | V | \alpha' \rangle|^2 (1 - \cos x) \frac{dx}{x^2}, \quad (37) \end{aligned}$$

если произвести подстановку  $(E'' - E') t / \hbar = x$ . При больших  $t$  это выражение становится равным

$$2t\hbar^{-1} |\langle E' \beta'' | V | \alpha' \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = \\ = 2\pi t\hbar^{-1} |\langle E' \beta'' | V | \alpha' \rangle|^2. \quad (38)$$

Таким образом, полная вероятность перехода к моменту времени  $t$  в конечное состояние, в котором  $\beta$  имеет значение, равное  $\beta''$ , оказывается пропорциональной  $t$ . Следовательно, имеется определенная *вероятность в единицу времени* для рассматриваемого перехода; величина ее равна

$$2\pi\hbar^{-1} |\langle E' \beta'' | V | \alpha' \rangle|^2. \quad (39)$$

Этот коэффициент вероятности пропорционален квадрату модуля матричного элемента энергии возмущения, связанного с данным переходом.

Если матричный элемент  $\langle E' \beta'' | V | \alpha' \rangle$  мал по сравнению с другими матричными элементами  $V$ , то следует пользоваться более точной формулой (26). Пользуясь соотношением (35), получим

$$\int_0^t \langle \alpha'' | V^*(t') | \alpha''' \rangle dt' \int_0^{t'} \langle \alpha''' | V^*(t'') | \alpha' \rangle dt'' = \\ = \langle \alpha'' | V | \alpha''' \rangle \langle \alpha''' | V | \alpha' \rangle \int_0^t e^{i(E'' - E''') t' / \hbar} dt' \times \\ \times \int_0^{t'} e^{i(E''' - E') t'' / \hbar} dt'' = \frac{\langle \alpha'' | V | \alpha''' \rangle \langle \alpha''' | V | \alpha' \rangle}{i(E''' - E') / \hbar} \times \\ \times \int_0^t \{ e^{i(E'' - E') t' / \hbar} - e^{i(E'' - E''') t' / \hbar} \} dt'.$$

Для  $E''$ , близких к  $E'$ , только первый член в подынтегральном выражении дает существенный вклад в вероятность перехода, а второй член можно отбросить. Учитывая это и подставляя в формулу (26), получим вместо (36) выражение

$$P(\alpha' \alpha'') = 2 \left| \langle \alpha'' | V | \alpha' \rangle - \sum_{\alpha''' \neq \alpha', \alpha''} \frac{\langle \alpha'' | V | \alpha''' \rangle \langle \alpha''' | V | \alpha' \rangle}{E''' - E'} \right|^2 \times \\ \times \frac{1 - \cos \frac{(E'' - E') t}{\hbar}}{(E'' - E')^2}.$$

Аналогично предыдущему получаем выражение для вероятности перехода в единицу времени в конечное состояние, где величины  $\beta$  равны  $\beta''$  и энергия  $E$  лежит вблизи  $E'$ .

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle E' \beta'' | V | \alpha' \rangle - \sum_{\alpha''' \neq \alpha', \alpha''} \frac{\langle E' \beta'' | V | \alpha''' \rangle \langle \alpha''' | V | \alpha' \rangle}{E''' - E'} \right|^2. \quad (40)$$

Это выражение показывает, какую роль в определении коэффициента вероятности играют промежуточные состояния, отличные от начального и конечного.

Для того чтобы приближения, использованные при выводе выражений (39) и (40), были законными, время  $t$  не должно быть ни слишком большим, ни слишком малым. Оно должно быть большим по сравнению с периодами атомной системы, для того чтобы было оправдано приближенное вычисление интеграла (37), приводящее к (38), и вместе с тем оно не должно быть чрезмерно большим, иначе перестанут быть справедливыми общие формулы (24) или (26). Действительно, если выбрать  $t$  достаточно большим, можно сделать вероятность (38) больше единицы. Верхний предел для  $t$  определяется условием, чтобы вероятности (24) либо (26) или умноженные на  $t$  выражения (39) либо (40) были малы по сравнению с единицей. Если энергия возмущения мала, то можно без затруднений подобрать значения  $t$ , удовлетворяющие одновременно обоим условиям.

## § 47. Аномальный эффект Зеемана

Одним из простейших примеров применения метода возмущений § 43 является расчет в первом приближении изменения уровней энергии, вызванного однородным магнитным полем. Задача об атоме водорода в однородном магнитном поле уже рассматривалась в § 41 и была столь простой, что не было необходимости в теории возмущений. Случай произвольного атома ненамного сложнее, если допустить некоторые приближения, приводящие к простой модели атома.

Рассмотрим сначала атом в отсутствие магнитного поля и будем искать интегралы движения или величины, приближенно являющиеся таковыми. Полный момент количества движения атома, скажем, вектор  $\mathbf{j}$ , несомненно является интегралом движения. Этот момент количества движения



можно рассматривать как сумму двух частей: полного орбитального момента всех электронов  $l$ , и полного спинного момента  $s$ . Таким образом, имеем  $j = l + s$ . Влияние спинного магнитного момента на движение электронов мало по сравнению с влиянием кулоновского поля, и им можно в первом приближении пренебречь. В этом приближении спиновый момент количества движения каждого электрона является интегралом движения, поскольку отсутствуют силы, которые могут изменить ориентацию спина. Итак,  $s$ , а значит, также и  $l$  будут интегралами движения. Величины векторов  $l$ ,  $s$  и  $j$ , которые мы обозначим через  $l$ ,  $s$  и  $j$  даются выражениями

$$l + \frac{1}{2} \hbar = \left( l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$s + \frac{1}{2} \hbar = \left( s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$j + \frac{1}{2} \hbar = \left( j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

соответствующими уравнениям (39) § 36. Они коммутируют друг с другом и из последовательности чисел (47) § 36 видно, что при данных численных значениях  $l$  и  $s$  возможными численными значениями  $j$  являются

$$l + s, l + s - \hbar, \dots, |l - s|.$$

Рассмотрим стационарное состояние, в котором  $l$ ,  $s$  и  $j$  имеют определенные значения в соответствии с вышеизложенной схемой. Энергия в этом состоянии будет зависеть от  $l$ . Можно было бы думать, что, если пренебрегать спинowymi магнитными моментами, то энергия не будет зависеть ни от  $s$ , ни от направления  $s$  относительно  $l$ , и следовательно, что она не будет зависеть от  $j$ . Однако в гл. IX будет показано, что энергия сильно зависит от величины  $s$  вектора  $s$  (хотя и не зависит от его направления, если пренебречь спинowymi магнитными моментами) в силу некоторого явления, возникающего из-за неразличимости электронов. Таким образом, имеются различные уровни энергии системы для различных  $l$  и  $s$ . Это означает, что  $l$  и  $s$  являются функциями от энергии в смысле общего определения функции.

данного в § 11, т. е. в том смысле, что если фиксирована энергия стационарного состояния, то фиксированы и величины  $l$  и  $s$ .

Мы можем теперь учесть влияние спинowego магнитного момента, трактуя его как особое возмущение по методу § 43. Энергия невозмущенной системы будет приближенно интегралом движения, а следовательно,  $l$  и  $s$ , будучи функциями энергии, также будут приближенно интегралами движения. Направления векторов  $l$  и  $s$ , однако, не являются функциями невозмущенной энергии, поэтому они не обязаны быть приближенно интегралами движения и могут испытывать большие «вековые» изменения. Так как вектор  $j$  является постоянным, то единственно возможным изменением  $l$  и  $s$  является прецессия вокруг  $j$ . Мы имеем, таким образом, приближенную модель, состоящую из двух векторов постоянной длины  $l$  и  $s$ , прецессирующих вокруг их суммы  $j$ , которая является постоянным вектором. Энергия определяется в основном величинами векторов  $l$  и  $s$  и лишь незначительно зависит от их относительного направления, определяемого  $j$ . Следовательно, состояния с одними и теми же  $l$  и  $s$ , но разными  $j$  будут иметь слегка различные энергии, образуя то, что называется *мультиплетом*.

Считая нашу модель невозмущенной системой, предположим теперь, что на нее действует однородное магнитное поле величины  $\mathcal{H}$  в направлении оси  $z$ . Добавочная энергия, появляющаяся из-за магнитного поля, состоит из суммы членов вида

$$\frac{e\mathcal{H}}{2mc} (m_z + \hbar\sigma_z) \quad (41)$$

(аналогичных последнему члену в уравнении (89) § 41), взятой по всем электронам, и будет иметь вид

$$\frac{e\mathcal{H}}{2mc} \sum (m_z + \hbar\sigma_z) = \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (l_z + 2s_z) = \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (j_z + s_z). \quad (42)$$

Это и есть наша энергия возмущения  $V$ . Воспользуемся методом § 43 для определения изменения уровней энергии, вызванного возмущением  $V$ . Метод будет законным только в случае столь слабого поля, что  $V$  мало по сравнению с разностями энергии внутри мультиплета.

Наша невозмущенная система вырождена, так как не определено направление вектора  $j$ . Мы должны поэтому

из представителей в гейзенберговском представлении для невозмущенной системы выбрать те матричные элементы, которые принадлежат строкам и столбцам, относящимся к одному и тому же уровню энергии, и определить собственные значения полученной таким образом матрицы. Лучше всего это можно сделать, разделив  $V$  на две части, одна из которых есть интеграл невозмущенного движения, так что ее представитель содержит только такие матричные элементы, которые принадлежат строкам и столбцам, относящимся к одному и тому же уровню невозмущенной системы, а представитель другой части содержит лишь матричные элементы, строки и столбцы которых относятся к разным энергиям, так что эта вторая часть не будет оказывать влияния на возмущение в первом приближении. Член, содержащий  $j_z$  в (42), является интегралом невозмущенного движения и поэтому целиком принадлежит к первой части. Для члена, содержащего  $s_z$ , имеем

$$s_z (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) = j_z (s_x j_x + s_y j_y + s_z j_z) + (s_z j_x - j_z s_x) j_x + \\ + (s_z j_y - j_z s_y) j_y$$

или

$$s_z = \frac{j_z}{j(j+\hbar)} \frac{1}{2} [j(j+\hbar) - l(l+\hbar) + s(s+\hbar)] - \\ - [\gamma_y j_x - \gamma_x j_y] \frac{1}{j(j+\hbar)}, \quad (43)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \gamma_x &= s_z j_y - j_z s_y = s_z l_y - l_z s_y = l_y s_z - l_z s_y, \\ \gamma_y &= j_z s_x - s_z j_x = l_z s_x - s_z l_x = l_x s_z - l_z s_x. \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Первый член в выражении для  $s_z$  — интеграл невозмущенного движения и поэтому относится целиком к первой части, тогда как второй член, как мы сейчас увидим, относится целиком ко второй части.

Аналогично выражениям (44) мы можем ввести величину

$$\gamma_z = l_x s_y - l_y s_x.$$

Легко показать, что имеет место равенство

$$j_x \gamma_x + j_y \gamma_y + j_z \gamma_z = 0$$

и что из формул (30) § 35 следует

$$[j_z, \gamma_x] = \gamma_y, \quad [j_z, \gamma_y] = -\gamma_x, \quad [j_z, \gamma_z] = 0.$$

Эти соотношения, связывающие  $j_x, j_y, j_z$  и  $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ , имеют тот же вид, что и соотношения, связывающие  $m_x, m_y, m_z$  и  $x, y, z$  в вычислениях правила отбора для матричного элемента в представлении, где  $k$  диагонально (см. § 40). Из полученного там результата, что все матричные элементы  $z$  исчезают, за исключением относящихся к двум значениям  $k$ , различающимся на  $\pm \hbar$ , мы можем заключить, что в представлении, где  $j$  диагонально, все матричные элементы  $\gamma_z$  и аналогично  $\gamma_x$  и  $\gamma_y$  исчезают, за исключением тех, которые относятся к двум значениям  $j$ , различающимся на  $\pm \hbar$ . Коэффициенты при  $\gamma_x$  и  $\gamma_y$  во втором члене правой части выражения (43) коммутируют с  $j$ , так что представитель всего члена в целом будет содержать лишь матричные элементы, относящиеся к двум значениям  $j$ , различающимся на  $\pm \hbar$ , а значит, и к двум различным уровням энергии невозмущенной системы.

Следовательно, после пренебрежения частью, содержащей матричные элементы, которые относятся к различным невозмущенным уровням энергии, энергия возмущения  $V$  будет иметь вид

$$\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc} j_z \left\{ 1 + \frac{j(j+\hbar) - l(l+\hbar) + s(s+\hbar)}{2j(j+\hbar)} \right\}. \quad (45)$$

Собственные значения этого выражения дают изменение уровней энергии в первом порядке. Мы можем сделать представители этого выражения диагональными, выбирая наше представление так, чтобы  $j_z$  было диагональным. Тогда это выражение непосредственно дает изменение в первом приближении уровней энергии, вызванное магнитным полем. Выражение (45) известно как формула Ланде.

Результат (45) справедлив только в предположении, что возмущение  $V$  мало по сравнению с разностями энергии в мультиплете. Для больших  $V$  нужна более сложная теория. Для очень сильных полей, при которых  $V$  велико по сравнению с разностями энергии в мультиплете, теория опять становится простой. Мы можем тогда вовсе пренебречь энергией спинового магнитного момента атома в отсутствие внешнего поля, так что для нашей невозмущенной системы

сами векторы  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{s}$ , а не только их величины  $l$  и  $s$  будут интегралами движения.

Энергия возмущения, равная по-прежнему  $\frac{e\mathcal{H}}{2mc} (j_z + s_z)$ , является теперь интегралом движения для невозмущенной системы, так что собственные значения этого выражения дают непосредственно изменение уровней энергии. Эти собственные значения являются целыми или полуцелыми кратными величинами  $\frac{e\mathcal{H}\hbar}{2mc}$ , смотря по тому, четно или нечетно число электронов в атоме.

## ГЛАВА VIII

### ЗАДАЧИ О СТОЛКНОВЕНИЯХ

#### § 48. Общие замечания

В этой главе мы будем рассматривать задачи, связанные с частицей, которая приходит из бесконечности, встречается или «сталкивается» с некоторой атомной системой, и после рассеяния на некоторый угол уходит опять на бесконечность. Атомную систему, производящую рассеяние, мы будем для краткости называть *рассеивателем*. Итак, мы имеем динамическую систему, состоящую из падающей частицы и рассеивателя, взаимодействующих друг с другом; эту систему нужно рассматривать по законам квантовой механики и, в частности, вычислить для нее вероятность рассеяния на данный угол. Обычно предполагается, что рассеиватель обладает бесконечной массой и покоится на протяжении всего процесса рассеяния. Задача о рассеянии впервые была решена Борном с помощью метода, по существу эквивалентного методу следующего параграфа. Следует иметь в виду, что рассеиватель сам по себе, как система, может иметь различные стационарные состояния и что, будучи в одном из этих состояний вначале, когда частица приходит из бесконечности, он может оказаться в другом состоянии после того, как частица ушла на бесконечность. Таким образом, налетающая частица может вызывать переходы в рассеивателе.

Оператор Гамильтона полной системы «рассеиватель + частица» не содержит времени явно, так как вся система будет иметь стационарные состояния, представляемые периодическими (во времени) решениями шредингеровского волнового уравнения. Для того чтобы правильно понять смысл этих стационарных состояний, следует проявить некоторую осторожность. Очевидно, что в *любом* состоянии движения системы частица будет проводить почти все время

на бесконечности, так что усредненная по времени вероятность нахождения частицы в любом конечном объеме будет равна нулю. Но в *стационарном* состоянии вероятность нахождения частицы в данном конечном объеме, так же как и другие результаты наблюдения, не должна зависеть от времени; следовательно, эта вероятность будет равна своему среднему по времени, которое, как мы видели, равно нулю. Значит, физический интерес представляют только относительные вероятности нахождения частицы в различных конечных объемах, поскольку абсолютные их значения все равны нулю. Полная энергия системы имеет сплошной спектр собственных значений, так как начальная энергия частицы может быть любой. Следовательно, кет-вектор стационарного состояния, скажем  $|s\rangle$ , будучи собственным вектором полной энергии, должен быть бесконечной длины. Физическое основание этому можно видеть в следующем. Пусть  $|s\rangle$  нормировано, и пусть  $Q$  — такая наблюдаемая некоторая функция положения частицы, которая равна единице, если частица находится внутри данного конечного объема, и равна нулю, если частица находится вне его. Тогда величина  $\langle s | Q | s \rangle$  будет равна нулю; но это означало бы, что среднее значение  $Q$  равно нулю, т. е. что равна нулю вероятность нахождения частицы в данном объеме. С таким вектором было бы неудобно работать. Однако если  $s$  имеет бесконечную длину, то величина  $\langle s | Q | s \rangle$  может быть конечной, и она будет давать тогда относительную вероятность нахождения частицы в данном объеме.

Для изображения состояния системы, соответствующего ненормированному кет-вектору  $|x\rangle$ , для которого, скажем,  $\langle x | x \rangle = n$ , можно предположить, что имеется  $n$  тождественных систем, занимающих один и тот же объем, но не взаимодействующих друг с другом, так что каждая движется независимо от других, как в гиббсовском ансамбле (§ 33). Если  $\alpha$  — некоторая наблюдаемая, мы можем тогда толковать величину  $\langle x | \alpha | x \rangle$  непосредственно как сумму значений  $\alpha$  для всех  $n$  систем. Применяя эти соображения к вышеупомянутому вектору  $|s\rangle$  бесконечной длины, соответствующему стационарному состоянию системы «рассеиватель + налетающая частица», мы должны представить себе бесконечное число таких систем с рассеивателями, находящимися в одной и той же точке и частицами, непрерывно-распределенными в пространстве. Число частиц в данном

конечном объеме будет изображаться величиной  $\langle s | Q | s \rangle$ , где  $Q$  — определенная выше наблюдаемая, равная единице, если частица находится в данном объеме, и нулю в противном случае. Если вектор представлен шредингеровской волновой функцией, содержащей декартовы координаты частицы, то квадрат модуля волновой функции может быть непосредственно истолкован как плотность частиц в этой картине. Необходимо, однако, помнить, что *каждая частица имеет свой отдельный рассеиватель*. Различные частицы могут принадлежать рассеивателям, находящимся в разных состояниях. Значит, для каждого состояния рассеивателя будет своя плотность частиц, именно, плотность тех частиц, которые принадлежат рассеивателю в данном состоянии. Это обстоятельство учитывается путем включения в волновую функцию переменных, описывающих состояние рассеивателя, в дополнение к переменным, описывающим положение частицы.

Для определения коэффициента рассеяния необходимо рассматривать *стационарные состояния* системы «рассеиватель + частица», например, если мы хотим определить вероятность рассеяния в различных направлениях, когда рассеиватель первоначально находится в заданном стационарном состоянии, а падающая частица первоначально имеет данную скорость в данном направлении, мы должны поступить следующим образом. Мы должны рассматривать такое стационарное состояние всей системы, картина которого в принятом выше способе описания содержит на большом расстоянии от рассеивателей только частицы, движущиеся с данной начальной скоростью в заданном направлении, и принадлежащие каждой к своему рассеивателю в данном начальном состоянии, кроме того, частицы, *уходящие* от рассеивателей и могущие принадлежать к рассеивателям в различных стационарных состояниях. Эта картина близко соответствует действительному положению дела при экспериментальном определении коэффициента рассеяния, с той лишь разницей, что на самом деле картина описывает только одну *действительную* систему «рассеиватель + частица». Получаемое в этой картине распределение уходящих частиц на бесконечности дает нам непосредственно все сведения о коэффициентах рассеяния, которые можно получить на опыте. Для практических расчетов, относящихся в стационарному состоянию, описываемому вышеупомя-



нutoй картиной, можно использовать метод возмущений, до некоторой степени аналогичный изложенному в § 43, принимая за невозмущенную систему, например такую, в которой отсутствует взаимодействие между частицей и рассеивателем.

При рассмотрении задач о столкновениях следует еще принять во внимание, что рассеиватель может поглотить и вновь испустить частицу. Такая возможность возникает, если существует одно или более состояний системы, являющихся *состояниями поглощения*. Состояние поглощения является *приблизительно* стационарным, и его можно считать связанным в том смысле, как сказано в конце § 38 (т. е. вероятность нахождения частицы на расстоянии, большем чем  $r$  от рассеивателя, при  $r \rightarrow \infty$  стремится к нулю). Так как состояние поглощения только приблизительно стационарно, то свойство быть связанным является временным, и по истечении достаточного времени будет конечная вероятность найти частицу удалившейся как угодно далеко. Физически это означает, что имеется конечная вероятность спонтанного испускания частицы. Тот факт, что мы вынуждены пользоваться словом «приблизительно» при формулировке условий, необходимых для существования явлений поглощения и испускания, показывает, что эти условия не могут быть выражены точным математическим образом. Можно придать смысл этим явлениям, только опираясь на метод возмущений. Они возникают тогда, когда невозмущенная система («рассеиватель + частица») имеет связанные состояния. Введение возмущения портит стационарный характер этих состояний и приводит к появлению спонтанного испускания и обратного ему поглощения.

Для вычисления вероятностей поглощения и испускания необходимо иметь дело с *нестационарными состояниями* системы, в противоположность случаю коэффициента рассеяния, так что нужно использовать метод § 44. Так, для вычисления коэффициента испускания нужно рассматривать вышеупомянутые нестационарные состояния поглощения. Кроме того, так как за поглощением всегда следует испускание, то невозможно отличить этот процесс от рассеяния в любом опыте, относящемся к установившемуся процессу, соответствующему стационарному состоянию системы. Различие может быть обнаружено лишь в нестационарных процессах, когда, например, используется поток

частиц, имеющий резко выраженное начало; тогда рассеянные частицы будут появляться сразу после того, как падающие частицы дошли до рассеивателя, частицы же, испытывавшие поглощение и последующее испускание, начнут появляться лишь спустя некоторое время. Такой поток частиц изображался бы некоторым вектором состояния бесконечной длины, и этот вектор мог бы служить для расчета коэффициента поглощения.

### § 49. Коэффициент рассеяния

Обратимся теперь к расчету коэффициента рассеяния, причем в первую очередь мы рассмотрим случай, когда нет поглощения и испускания, что означает отсутствие связанных состояний в невозмущенной системе. В качестве невозмущенной системы удобно взять такую, в которой отсутствует взаимодействие между рассеивателем и частицей. Ее оператор Гамильтона имеет вид

$$E = H_s + W, \quad (1)$$

где  $H_s$  — оператор Гамильтона одного лишь рассеивателя, а  $W$  — оператор Гамильтона одной лишь частицы, имеющей вид (в пренебрежении релятивистской механикой)

$$W = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (2)$$

Энергия возмущения  $V$ , которую мы предположили малой, будет функцией координат частицы  $x, y, z$  (а также, быть может, ее импульсов  $p_x, p_y, p_z$ ) и, кроме того, будет зависеть от динамических переменных, описывающих рассеиватель.

Так как мы интересуемся сейчас только стационарным состоянием всей системы, то будем пользоваться методом возмущений, аналогичным рассматриваемому в § 43. Наша невозмущенная система непременно имеет непрерывный спектр энергии, так как в ее состав входит свободная частица. Это обстоятельство приводит к некоторому видоизменению метода возмущений. Вопрос об изменении уровней энергии, вызванном возмущением, который был главным в § 43, больше не имеет смысла, и условие § 43 относительно использования одинакового числа штрихов для обозначения почти равных собственных значений  $E$  и  $H$  отпадает. Кроме того, рас-

щепление уровней энергии, которые мы имели в § 43 в случае вырожденной невозмущенной системы, теперь возникнуть не может, так как если невозмущенная система вырождена, то и возмущенная система, которая должна иметь непрерывный спектр энергий, будет вырожденной в той же самой мере.

Воспользуемся общей схемой уравнений, разработанной в начале § 43 (см. уравнения (1)–(4)), но в качестве невозмущенного состояния, образующего нулевое приближение, мы выберем стационарное состояние с энергией  $E'$ , в точности равной энергии  $H'$  возмущенного стационарного состояния. Тогда величины  $\alpha$ , определяемые вторым уравнением из системы (3) § 43, все равны нулю, и второе уравнение из системы (4) примет вид

$$(E' - E) | 1 \rangle = V | 0 \rangle. \quad (3)$$

Аналогично третье уравнение из системы (4) § 43 принимает вид

$$(E' - E) | 2 \rangle = V | 1 \rangle. \quad (4)$$

Перейдем к решению уравнения (3) и к определению коэффициента рассеяния в первом приближении. Уравнение (4) понадобится в § 51.

Пусть  $\alpha$  означает полный набор коммутирующих наблюдаемых, описывающих рассеиватель, притом таких, которые являются интегралами движения рассеивателя самого по себе и могут быть поэтому использованы для нумерации стационарных состояний рассеивателя. Для этого нужно, чтобы оператор  $H_s$  коммутировал со всеми  $\alpha$  и являлся функцией от  $\alpha$ . Мы можем выбрать такое представление полной системы, в котором все  $\alpha$  и координаты частицы  $x, y, z$  являются диагональными. В этом представлении оператор  $H_s$  будет диагональным. Пусть представителем кет-вектора  $| 0 \rangle$  будет  $\langle x \alpha' | 0 \rangle$ , а представителем  $| 1 \rangle$  будет  $\langle x \alpha' | 1 \rangle$ , где  $x$  означает  $x, y, z$  и штрих у  $x$  опущен для краткости. Вместо  $dx dy dz$  будем писать  $d^3x$ . Уравнение (3), выраженное через представители, при учете (1) и (2) принимает вид

$$\begin{aligned} \{E' - H_s(\alpha') + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\} \langle x \alpha' | 1 \rangle = \\ = \sum_{\alpha''} \int \langle x \alpha' | V | x'' \alpha'' \rangle d^3x'' \langle x'' \alpha'' | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Предположим, что налетающая частица имеет импульс  $\mathbf{p}^0$  и что начальное состояние рассеивателя есть  $\alpha^0$ . Стационарное состояние нашей невозмущенной системы, следовательно, будет таким, что  $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$  и  $\alpha = \alpha^0$ , и значит, его предстатель есть

$$\langle x\alpha' | 0 \rangle = \delta_{\alpha'\alpha^0} e^{i(\mathbf{p}^0, \mathbf{x})/\hbar}. \quad (6)$$

Уравнение (5) тогда напишется:

$$\left\{ E' - H_s(\alpha') + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \langle x\alpha' | 1 \rangle = \int \langle x\alpha' | V | x^0\alpha^0 \rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0, \mathbf{x}^0)/\hbar}$$

или

$$(k^2 + \nabla^2) \langle x\alpha' | 1 \rangle = F, \quad (7)$$

где

$$k^2 = 2m\hbar^{-2} \{ E' - H_s(\alpha') \} \quad (8)$$

и

$$F = 2m\hbar^{-2} \int \langle x\alpha' | V | x^0\alpha^0 \rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0, \mathbf{x}^0)/\hbar}. \quad (9)$$

Величина  $F$  есть определенная функция от  $x, y, z$  и  $\alpha'$ . Кроме того, мы имеем

$$E' = H_s(\alpha^0) + \mathbf{p}^{02}/2m. \quad (10)$$

Наша задача состоит в отыскании такого решения  $\langle x\alpha' | 1 \rangle$  уравнения (7), которое вдали от рассеивателя, т. е. при больших  $x, y, z$ , изображает лишь уходящие частицы. Квадрат модуля этого решения  $|\langle x\alpha' | 1 \rangle|^2$  будет тогда давать плотность рассеянных частиц, относящуюся к рассеивателю в состоянии  $\alpha'$ , если плотность падающих частиц, равная  $|\langle x\alpha^0 | 0 \rangle|^2$ , принята за единицу. Если перейти к полярным координатам  $r, \theta, \varphi$ , то уравнение (7) примет вид

$$\left\{ k^2 + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \times \\ \times \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle = F. \quad (11)$$

Величина  $F$  должна стремиться к нулю при  $r \rightarrow \infty$  в силу физического условия, что энергия взаимодействия между рассеивателем и частицей стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ . Если вовсе пренебречь величиной  $F$  в (11), то при больших  $r$  приближенным решением уравнения (11) будет

$$\langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle = u(\theta\varphi\alpha') r^{-1} e^{ikr}, \quad (12)$$

где  $u$  — произвольная функция от  $\theta, \varphi$  и  $\alpha'$ ; действительно, при подстановке этого выражения в левую часть (11) полу-

чатся члены порядка  $r^{-3}$ . Если же не пренебрегать величиной  $F$ , то решение уравнения (11) по-прежнему будет при больших  $r$  иметь вид (12), если только  $F$  исчезает достаточно быстро при  $r \rightarrow \infty$ . При этом функция  $u$  будет теперь определяться поведением решения при малых  $r$ .

Для таких значений  $\alpha'$  величин  $\alpha$ , которым соответствуют по формуле (8) положительные  $k^2$ , следует взять в формуле (12) в качестве  $k$  положительный квадратный корень из  $k^2$ , чтобы (12) представляло только уходящие частицы, т. е. частицы, для которых радиальная компонента импульса, равная, согласно § 38,  $p_r - i\hbar r^{-1}$  или  $-i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ , положительна. Плотность рассеянных частиц, соответствующая рассеивателю в состоянии  $\alpha$ , равная квадрату модуля величины (12), убывает при возрастании  $r$  обратно пропорционально  $r^2$ , как и должно быть на основании физических соображений. Угловое распределение рассеянных частиц дается величиной  $|u(\theta, \alpha')|^2$ . Далее, величина  $\mathbf{P}'$  импульса рассеянных частиц должна быть равна  $k\hbar$ , поскольку направление импульса при больших  $r$  должно быть радиальным; поэтому энергия частиц равна

$$\frac{P'^2}{2m} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = E' - H_s(\alpha') = H_s(\alpha^0) - H_s(\alpha') + \frac{p^{02}}{2m}$$

(принимая во внимание (8) и (10)). Это в точности равно энергии налетающей частицы  $p^{02}/2m$  за вычетом энергии, переданной рассеивателю и равной  $H_s(\alpha') - H_s(\alpha^0)$  в соответствии с законом сохранения энергии. Если значения  $\alpha'$  таковы, что им соответствуют отрицательные  $k^2$ , то рассеянные частицы отсутствуют: полная начальная энергия при этом недостаточна для того, чтобы перевести рассеиватель в состояние  $\alpha'$ .

Мы должны теперь вычислить величину  $u(\theta, \alpha')$  для состояний  $\alpha'$ , которые соответствуют положительным  $k^2$ , и получить угловое распределение рассеянных частиц, относящихся к рассеивателю в состоянии  $\alpha'$ . Достаточно вычислить  $u$  в направлении полярной оси  $\theta = 0$ , поскольку это направление произвольно. Воспользуемся теоремой Грина, которая гласит, что для любых двух функций  $A$  и  $B$  объемный интеграл

$$\int (A \nabla^2 B - B \nabla^2 A) d^3x,$$

взятый по некоторому объему, равен поверхностному интегралу

$$\int \left( A \frac{\partial B}{\partial n} - B \frac{\partial A}{\partial n} \right) dS,$$

взятому по поверхности, ограничивающей этот объем, причем  $\partial/\partial n$  означает дифференцирование по нормали к поверхности. Мы положим

$$A = e^{-ikr \cos \theta}, \quad B = \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle$$

и применим теорему к большой сфере, центр которой находится в начале координат. Подынтегральное выражение в объемном интеграле равно, в силу соотношения (7) или (11),

$$\begin{aligned} e^{-ikr \cos \theta} \nabla^2 \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle - \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle \nabla^2 e^{-ikr \cos \theta} = \\ = e^{-ikr \cos \theta} (\nabla^2 + k^2) \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle = e^{-ikr \cos \theta} F, \end{aligned}$$

тогда как в поверхностном интеграле подынтегральное выражение будет равняться, с учетом (12),

$$\begin{aligned} e^{-ikr \cos \theta} \frac{\partial}{\partial r} \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle - \langle r\theta\varphi\alpha' | 1 \rangle \frac{\partial}{\partial r} e^{-ikr \cos \theta} = \\ = e^{-ikr \cos \theta} u \left( -\frac{1}{r^2} + \frac{ik}{r} \right) e^{ikr} + i \frac{u}{r} e^{ikr} k \cos \theta e^{-ikr \cos \theta} = \\ = i k u r^{-1} (1 + \cos \theta) e^{ikr (1 - \cos \theta)}, \end{aligned}$$

где пренебрежено величиной  $r^{-2}$ . Следовательно, получаем

$$\int e^{-ikr \cos \theta} F d^3x = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} r^2 \sin \theta d\theta i k u r^{-1} (1 + \cos \theta) e^{ikr (1 - \cos \theta)},$$

причем объемный интеграл в левой части берется по всему пространству. Правая часть, будучи проинтегрированной по частям относительно  $\theta$ , принимает вид

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ [u (1 + \cos \theta) e^{ikr (1 - \cos \theta)}]_{\theta=0}^{\theta=\pi} - \right. \\ \left. - \int_0^{\pi} e^{ikr (1 - \cos \theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} [u (1 + \cos \theta)] d\theta \right\}. \end{aligned}$$

Второй член в фигурных скобках имеет порядок величины  $r^{-1}$ , как можно обнаружить при дальнейшей интеграции

по частям, и следовательно, им можно пренебречь. Мы приходим к соотношению

$$\int e^{-ikr \cos \theta} F d^3x = -2 \int_0^{2\pi} d\varphi u(0, \varphi, \alpha') = -4\pi u(0, \varphi, \alpha'),$$

которое дает величину  $u(\theta, \varphi, \alpha')$  для  $\theta = 0$ .

Этот результат может быть записан в виде

$$u(0, \varphi, \alpha') = -(4\pi)^{-1} \int e^{-iP'r \cos \theta / \hbar} F d^3x, \quad (13)$$

так как  $P' = k\hbar$ . Если вектор  $\mathbf{p}'$  обозначает импульс рассеянного электрона, движущегося в некотором направлении (величина его равна  $P'$ ), то значение  $u$  для этого направления равно

$$u(\theta' \varphi' \alpha') = -(4\pi)^{-1} \int e^{-i(\mathbf{p}', \mathbf{x}) / \hbar} F d^3x.$$

Это вытекает из (13), если вышеупомянутое направление выбрать в качестве полярной оси. С помощью (9) это выражение принимает вид

$$u(\theta' \varphi' \alpha') = -(2\pi)^{-1} m \hbar^{-2} \int \int e^{-i(\mathbf{p}', \mathbf{x}) / \hbar} d^3x \times \\ \times \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}^0 \alpha^0 \rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0, \mathbf{x}^0) / \hbar} = -2\pi m \hbar \langle \mathbf{p}' \alpha' | V | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle. \quad (14)$$

Здесь произведено преобразование от координат  $\mathbf{x}$  к импульсам  $\mathbf{p}$ , причем использована функция (54) § 23. Одна буква  $\mathbf{p}$  обозначает здесь три компоненты импульса.

Плотность рассеянных частиц, относящихся к рассеивателю в состоянии  $\alpha'$ , дается величиной  $|u(\theta' \varphi' \alpha')|^2 / r^2$ . Так как скорость частиц есть  $P'/m$ , то число частиц, появляющихся в единицу времени в единичном телесном угле около направления  $\mathbf{p}'$ , равно

$$\frac{P'}{m} |u(\theta' \varphi' \alpha')|^2.$$

Плотность падающих частиц принята при этом за единицу, так что число падающих частиц, пересекающих единичную площадку за единицу времени, равно их скорости  $P^0/m$ , где  $P^0$  — величина  $\mathbf{p}^0$ . Следовательно, эффективное сечение, которое должны задеть падающие частицы, чтобы испытать рассеяние в единичный телесный угол около направления  $\mathbf{p}'$ , и перевести рассеиватель в

ражению (22) точный смысл, так как по существу мы интегрируемся только интегралами от представителей состояния, когда представление имеет непрерывные области строк и столбцов. Мы видим, что уравнение (21) недостаточно для полного определения представителя  $\langle P\omega\chi' | 1 \rangle$ , так как в формулу (22) входит произвольная функция  $\lambda$ . Мы должны выбрать эту функцию  $\lambda$  таким образом, чтобы выражение  $\langle P\omega\chi' | 1 \rangle$  представляло только уходящие частицы, поскольку мы хотим, чтобы все приходящие частицы входили в состав вектора  $| 0 \rangle$ .

Рассмотрим сначала общий случай, когда представитель состояния частицы удовлетворяет уравнению типа

$$(W' - W) \langle P\omega\chi | \rangle = f(P\omega\chi), \quad (23)$$

где  $f(P\omega\chi)$  — произвольная функция от  $P$ ,  $\omega$  и  $\chi$ , и  $W' —$  число, превосходящее  $mc^2$ , так что  $\langle P\omega\chi | \rangle$  имеет вид

$$\langle P\omega\chi | \rangle = \frac{f(P\omega\chi)}{W' - W} + \lambda(\omega\chi) \delta(W' - W). \quad (24)$$

Определим, каким должно быть  $\lambda$  для того, чтобы  $\langle P\omega\chi | \rangle$  могло представлять только уходящие частицы. Мы можем это сделать, если преобразовать  $\langle P\omega\chi | \rangle$  к координатному представлению или, точнее, к представлению в полярных координатах  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  и сравнить результат с выражением (12) для больших  $r$ . Функция преобразования есть

$$\begin{aligned} \langle r\theta\varphi | P\omega\chi \rangle &= \\ &= h^{-\frac{3}{2}} e^{i(p, x)/\hbar} = h^{-\frac{3}{2}} e^{i\frac{Pr}{\hbar} [\cos\omega \cos\theta + \sin\omega \sin\theta \cos(\chi - \varphi)]}. \end{aligned}$$

Для направления  $\theta = 0$  имеем

$$\begin{aligned} \langle r0\varphi | \rangle &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^\pi \sin\omega d\omega e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega} \langle P\omega\chi | \rangle = \\ &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \left\{ - \left[ \frac{e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega}}{iPr/\hbar} \langle P\omega\chi | \rangle \right]_{\omega=0}^{\omega=\pi} + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\pi d\omega e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega} \frac{\partial}{\partial\omega} \langle P\omega\chi | \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Второй член в фигурных скобках — порядка  $r^{-2}$ , в чем можно убедиться путем дальнейшего интегрирования по



нием, локализованным в малом объеме, не может иметь определенной поляризации. Эти факты означают, что наблюдаемая, соответствующая поляризации фотона, коммутирует с его импульсом, но не с его координатой. Результаты в методе импульсного представления непосредственно применимы к случаю фотона; необходимо лишь ввести в представителе поляризационную переменную и рассматривать ее наравне с величинами  $\alpha$ , описывающими рассеиватель. Метод же координатного представления здесь неприменим. Далее, имея дело с фотонами, необходимо принимать во внимание релятивистскую механику. Это может быть легко сделано в импульсном представлении, но не так легко в координатном представлении.

Уравнение (3) справедливо и для релятивистской механики, но  $W$  в этом случае дается выражением

$$\frac{W^2}{c^2} = m^2 c^2 + P^2 = m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \quad (16)$$

вместо выражения (2). Будучи записано в импульсном представлении, уравнение (3) имеет вид

$$\{E' - H_s(\alpha') - W\} \langle p\alpha' | 1 \rangle = \langle p\alpha' | V | 0 \rangle,$$

где для краткости написано  $p$  вместо  $p'$  и подразумевается, что величина  $W$  есть функция от  $p_x, p_y, p_z$ , определяемая из (16). Предыдущее уравнение можно переписать в виде

$$(W' - W) \langle p\alpha' | 1 \rangle = \langle p\alpha' | V | 0 \rangle, \quad (17)$$

где

$$W' = E' - H_s(\alpha'). \quad (18)$$

Эта величина представляет собой энергию, необходимую, согласно закону сохранения энергии, для того, чтобы рассеянная частица принадлежала рассеивателю в состоянии  $\alpha'$ . Вектор  $|0\rangle$  в координатном представлении дается выражением (6), а базисный вектор  $|p^0\alpha^0\rangle$  представляется выражением

$$\langle x\alpha' | p^0\alpha^0 \rangle = \delta_{\alpha'\alpha^0} \langle x | p^0 \rangle = \delta_{\alpha'\alpha^0} h^{-\frac{3}{2}} e^{i(p^0, x)/\hbar},$$

как вытекает из вида функции преобразования (54) § 23. Следовательно,

$$|0\rangle = h^{3/2} |p^0\alpha^0\rangle \quad (19)$$

и уравнение (17) может быть записано в виде

$$(W' - W) \langle p\alpha' | 1 \rangle = h^{3/2} \langle p\alpha' | V | p^0\alpha^0 \rangle. \quad (20)$$

Перейдем теперь от декартовых координат  $p_x, p_y, p_z$  к полярным координатам  $P, \omega, \chi$  согласно формулам

$$p_x = P \cos \omega, \quad p_y = P \sin \omega \cos \chi, \quad p_z = P \sin \omega \sin \chi.$$

Если в новом представлении взять весовую функцию в виде  $P^2 \sin \omega$ , то вес, приписываемый любому объему в импульсном пространстве, будет тем же самым, что и в предыдущем импульсном представлении, так что преобразование координат будет означать просто перенумерацию строк и столбцов матрицы без изменения матричных элементов.

Таким образом, в новом представлении уравнение (20) примет вид

$$(W' - W) \langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle = h^{3/2} \langle P \omega \chi \alpha' | V | P^0 \omega^0 \chi^0 \alpha^0 \rangle, \quad (21)$$

где  $W$  теперь будет функцией одной переменной  $P$ .

Коэффициент при  $\langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle$ , именно,  $W' - W$  будет теперь просто множителем, а не дифференцированным оператором, как было в координатном представлении. Мы можем поэтому разделить на этот множитель и получить явное выражение для  $\langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle$ . Если, однако,  $\alpha'$  таково, что  $W'$ , определяемое выражением (18), больше  $mc^2$ , то этот множитель обращается в нуль в некоторой точке области изменения  $P$ , именно, в точке  $P = P'$ , которая связана с  $W'$  соотношением (16). Функция  $\langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle$  будет, следовательно, иметь особенность в этой точке. Эта особенность показывает, что  $\langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle$  представляет бесконечное число частиц, движущихся на большом расстоянии от рассеивателя с энергиями, близкими к  $W'$ , и следовательно, именно эту особенность нужно исследовать для того, чтобы определить угловое распределение на бесконечности. Результат деления выражения (21) на  $W' - W$ , согласно формуле (13) § 15, имеет вид

$$\langle P \omega \chi \alpha' | 1 \rangle = h^{3/2} \langle P \omega \chi \alpha' | V | P^0 \omega^0 \chi^0 \alpha^0 \rangle \frac{1}{W' - W} + \\ + \lambda (\omega \chi \alpha') \delta(W' - W), \quad (22)$$

где  $\lambda$  — произвольная функция от  $\omega, \chi$  и  $\alpha'$ . Для того чтобы придать смысл первому члену в правой части равенства (22), мы условимся, что интеграл от этого члена по  $P$ , взятый по области, включающей точку  $P'$ , есть предел при  $\varepsilon \rightarrow 0$  интеграла, в котором исключена малая область от  $P' - \varepsilon$  до  $P' + \varepsilon$ . Этого достаточно, чтобы придать вы-

ражению (22) точный смысл, так как по существу мы интегрируемся только интегралами от представителей состояния, когда представление имеет непрерывные области строк и столбцов. Мы видим, что уравнение (21) недостаточно для полного определения представителя  $\langle P\omega\chi' | 1 \rangle$ , так как в формулу (22) входит произвольная функция  $\lambda$ . Мы должны выбрать эту функцию  $\lambda$  таким образом, чтобы выражение  $\langle P\omega\chi' | 1 \rangle$  представляло только уходящие частицы, поскольку мы хотим, чтобы все приходящие частицы входили в состав вектора  $| 0 \rangle$ .

Рассмотрим сначала общий случай, когда представитель состояния частицы удовлетворяет уравнению типа

$$(W' - W) \langle P\omega\chi | \rangle = f(P\omega\chi), \quad (23)$$

где  $f(P\omega\chi)$  — произвольная функция от  $P$ ,  $\omega$  и  $\chi$ , и  $W'$  — число, превосходящее  $mc^2$ , так что  $\langle P\omega\chi | \rangle$  имеет вид

$$\langle P\omega\chi | \rangle = \frac{f(P\omega\chi)}{W' - W} + \lambda(\omega\chi) \delta(W' - W). \quad (24)$$

Определим, каким должно быть  $\lambda$  для того, чтобы  $\langle P\omega\chi | \rangle$  могло представлять только уходящие частицы. Мы можем это сделать, если преобразовать  $\langle P\omega\chi | \rangle$  к координатному представлению или, точнее, к представлению в полярных координатах  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  и сравнить результат с выражением (12) для больших  $r$ . Функция преобразования есть

$$\langle r\theta\varphi | P\omega\chi \rangle = h^{-\frac{3}{2}} e^{i(p, x)/\hbar} = h^{-\frac{3}{2}} e^{i\frac{Pr}{\hbar} [\cos\omega \cos\theta + \sin\omega \sin\theta \cos(\chi - \varphi)]}.$$

Для направления  $\theta = 0$  имеем

$$\begin{aligned} \langle r0\varphi | \rangle &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^\pi \sin\omega d\omega e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega} \langle P\omega\chi | \rangle = \\ &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \left\{ - \left[ \frac{e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega}}{iPr/\hbar} \langle P\omega\chi | \rangle \right]_{\omega=0}^{\omega=\pi} + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\pi d\omega \frac{e^{i\frac{Pr}{\hbar} \cos\omega}}{iPr/\hbar} \frac{\partial}{\partial\omega} \langle P\omega\chi | \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Второй член в фигурных скобках — порядка  $r^{-2}$ , в чем можно убедиться путем дальнейшего интегрирования по

частям по  $\omega$ , и поэтому им можно пренебречь. Остается

$$\begin{aligned} \langle r0\varphi | \rangle &= ih^{-\frac{1}{2}} (2\pi r)^{-1} \int_0^\infty P dP \int_0^{2\pi} d\chi \times \\ &\quad \times \left\{ e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} \langle P\pi\chi | \rangle - e^{i\frac{Pr}{\hbar}} \langle P0\chi | \rangle \right\} = \\ &= ih^{-\frac{1}{2}} r^{-1} \int_0^\infty P dP \left\{ e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} \langle P\pi\chi | \rangle - e^{i\frac{Pr}{\hbar}} \langle P0\chi | \rangle \right\}. \quad (25) \end{aligned}$$

Если мы подставим вместо  $\langle P\omega\chi | \rangle$  его значение, даваемое формулой (24), то первый член в подынтегральном выражении (25) даст

$$ih^{-\frac{1}{2}} r^{-1} \int_0^\infty P dP e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} \left\{ \frac{f(P\pi\chi)}{W' - W} + \lambda(\pi\chi) \delta(W' - W) \right\}. \quad (26)$$

Член, содержащий  $\delta(W' - W)$ , может быть сразу проинтегрирован. Если использовать вытекающее из (16) соотношение  $P dP = \frac{W dW}{c^2}$ , это дает

$$\begin{aligned} ih^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} \int_{mc^2}^\infty W dW e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} \lambda(\pi\chi) \delta(W' - W) = \\ = ih^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' \lambda(\pi\chi) e^{-i\frac{P'r}{\hbar}}. \quad (27) \end{aligned}$$

Для того чтобы проинтегрировать другой член в (26), воспользуемся формулой

$$\int_0^\infty g(P) \frac{e^{-i\frac{Pr}{\hbar}}}{P' - P} dP = g(P') \int_0^\infty \frac{e^{-i\frac{P'r}{\hbar}}}{P' - P} dP, \quad (28)$$

верной для любой непрерывной функции  $g(P)$ , если пренебречь членами, содержащими  $r^{-1}$ . Эта формула справедлива потому, что разность  $\frac{g(P)}{P' - P} - \frac{g(P')}{P' - P}$  есть непрерывная функция, а для любой непрерывной функции интеграл  $\int_0^\infty K(P) e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} dP$  будет порядка  $r^{-1}$ . Вычисляя правую часть (28) и пренебрегая членами, содержащими  $r^{-1}$ , а также

пренебрегая малой областью от  $P' - \varepsilon$  до  $P' + \varepsilon$  в промежулке интегриации, получим

$$\begin{aligned} g(P') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i \frac{P'r}{\hbar}}}{P' - P} dP &= g(P') e^{-i \frac{P'r}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(P' - P)r/\hbar}}{P' - P} dP = \\ &= i g(P') e^{-i \frac{P'r}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(P' - P)r/\hbar}{(P' - P)} dP = i \pi g(P') e^{-i \frac{P'r}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (29)$$

В нашем случае  $g(P)$  равно

$$g(P) = i \hbar^{-\frac{1}{2}} r^{-1} P f(P \pi \chi) \frac{P' - P}{W' - W}.$$

Это выражение имеет при  $P = P'$  предельное значение, равное

$$g(P') = i \hbar^{-\frac{1}{2}} r^{-1} P' f(P' \pi \chi) \frac{W'}{P' c^2} = i \hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' f(P' \pi \chi).$$

Подставляя это в (29) и добавляя выражение (27), получим следующее значение интеграла (26):

$$\hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' \{ -\pi f(P' \pi \chi) + i \lambda(\pi \chi) \} e^{-i \frac{P'r}{\hbar}}. \quad (30)$$

Аналогично второй член в подынтегральном выражении (25) дает

$$\hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' \{ -\pi f(P' 0 \chi) - i \lambda(0 \chi) \} e^{i \frac{P'r}{\hbar}}. \quad (31)$$

Сумма этих двух выражений есть значение величины  $\langle r 0 \varphi | \rangle$  при большом  $r$ .

Нам требуется, чтобы  $\langle r 0 \varphi | \rangle$  представляло только уходящие частицы; следовательно, это выражение должно быть пропорционально  $e^{i P' r / \hbar}$ . Значит, выражение (30) должно обращаться в нуль, так что

$$\lambda(\pi \chi) = -i \pi f(P' \pi \chi). \quad (32)$$

Мы видим, таким образом, что условие, в силу которого  $\langle r \theta \varphi | \rangle$  должно представлять только частицы, уходящие в направлении  $\theta = 0$ , фиксирует величину  $\lambda$  для противоположного направления  $\theta = \pi$ . Так как направление  $\theta = 0$  или  $\omega = 0$  оси нашей полярной системы координат ничем

не выделено, то мы можем обобщить (32) и написать

$$\lambda(\omega\chi) = -i\pi f(P'\omega\chi). \quad (33)$$

Это дает величину  $\lambda$  для произвольного направления. Подстановка этого выражения в формулу (24) приводит к результату, который можно записать в виде

$$\langle P\omega\chi | \rangle = f(P\omega\chi) \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W) \right\}, \quad (34)$$

так как в члене, содержащем множителем  $\delta(W' - W)$ , можно, не изменяя величины этого члена, заменить  $P$  на  $P'$ . Условие, чтобы выражение  $\langle P\omega\chi | \rangle$  представляло только уходящие частицы, состоит в том, что это выражение должно содержать множитель

$$\frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W). \quad (35)$$

Интересно отметить, что этот множитель имеет вид правой части уравнения (15) § 15.

При  $\lambda$ , определяемом согласно (33), выражение (30) обращается в нуль и величина  $\langle r0\phi | \rangle$  определяется при больших  $r$  одним лишь выражением (31), т. е.

$$\langle r0\phi | \rangle = -2\pi\hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' f(P'0\chi) e^{i\frac{P'r}{\hbar}}.$$

Обобщая это равенство, получим

$$\langle r\theta\phi | \rangle = -2\pi\hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} r^{-1} W' f(P'\omega\chi) e^{i\frac{P'r}{\hbar}}.$$

Мы получили для любого направления  $\theta, \phi$  величину  $\langle r\theta\phi | \rangle$ , выраженную через  $f(P'\omega\chi)$  для того же самого направления, обозначаемого через  $\omega, \chi$ . Это выражение имеет вид (12), причем входящая в (12) величина  $u$  равна

$$u(\theta\phi) = -2\pi\hbar^{-\frac{1}{2}} c^{-2} W' f(P'\omega\chi).$$

Она представляет, таким образом, распределение уходящих частиц с импульсом  $P'$ , а именно, число таких частиц равно

$$\frac{c^2 P'}{W'} |u|^2 = \frac{4\pi^2 W' P'}{\hbar c^2} |f(P'\omega\chi)|^2 \quad (36)$$

на единицу телесного угла в единицу времени. Это именно то распределение, которое представляется величиной  $\langle P\omega\chi | \rangle$  в формуле (34).

Из этого общего результата мы можем заключить, что всегда, когда имеется представитель  $\langle P\omega\chi | \rangle$ , представляющий только уходящие частицы и удовлетворяющий уравнению типа (32), число частиц в единичном телесном угле в единицу времени дается формулой (36). Если  $\langle P\omega\chi | \rangle$  встречается в задаче, в которой число падающих частиц задается на единицу объема, и равно единице, то это будет соответствовать коэффициенту рассеяния

$$\frac{4\pi^2 W^0 W' P'}{hc^4 P^0} |f(P'\omega\chi)|^2. \quad (37)$$

Как видно, существенным является лишь значение функции  $f(P\omega\chi)$  в точке  $P = P'$ .

Если мы теперь применим эту общую теорию к уравнениям (21) и (22), то получим

$$f(P\omega\chi) = h^{3/4} \langle P\omega\chi\alpha' | V | P^0\omega^0\chi^0\alpha^0 \rangle.$$

Следовательно, учитывая выражение (37), коэффициент рассеяния есть

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} |\langle P'\omega\chi\alpha' | V | P^0\omega^0\chi^0\alpha^0 \rangle|^2. \quad (38)$$

Если пренебречь релятивистскими эффектами и положить  $\frac{W^0 W'}{c^4} = m^2$ , то этот результат приводится к результату (15), полученному в предыдущем параграфе с помощью теоремы Грина.

## § 51. Дисперсионное рассеяние

Рассмотрим теперь рассеяние в том случае, когда падающая частица может быть поглощена, т. е. когда наша невозмущенная система «рассеиватель + частица» имеет связанные стационарные состояния с поглощенной частицей. Как мы увидим, существование таких связанных состояний невозмущенной системы оказывает существенное влияние на рассеяние в возмущенной системе, причем влияние это

сильно зависит от энергии падающей частицы, приводя к явлению дисперсии в оптике в том случае, когда падающей частицей является фотон.

Воспользуемся представлением, для которого базисные векторы соответствуют стационарным состояниям невозмущенной системы, как было в случае импульсного представления в предыдущем параграфе. В качестве этих стационарных состояний мы выберем состояния  $(p'\alpha')$ , в которых частица имеет определенный импульс  $p'$ , и рассеиватель находится в определенном состоянии  $\alpha'$ , и кроме того связанные состояния  $k$ , которые образуют отдельную дискретную совокупность; мы предположим, что эти состояния все независимы и ортогональны. Это предположение неточно, когда частицей является электрон или атомное ядро, так как в этом случае в состоянии поглощения  $k$  частица все же будет где-то находиться, так что следует ожидать, что можно разложить  $|k\rangle$  по собственным векторам  $|x'\alpha'\rangle$  величин  $x, y, z$  и  $\alpha$ , а значит, и по векторам  $|p'\alpha'\rangle$ . С другой стороны, если частицей является фотон, то в состояниях поглощения он не существует, поэтому эти состояния несомненно являются независимыми и ортогональными по отношению к состояниям  $(p'\alpha')$ , в которых частица существует. Следовательно, в этом практически важном случае наше предположение справедливо.

Поскольку нас интересует рассеяние, мы по-прежнему должны рассматривать *стационарные* состояния всей системы. Однако мы теперь имеем дело со вторым приближением, так что мы не можем ограничиться использованием только уравнения (3), а должны использовать также и (4). Уравнение (3), выраженное через представители в рассматриваемом представлении, имеет вид

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) \langle p\alpha' | 1 \rangle &= \langle p\alpha' | V | 0 \rangle, \\ (E' - E_k) \langle k | 1 \rangle &= \langle k | V | 0 \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

где  $W'$  — функция от  $E'$  и  $\alpha'$ , определяемая выражением (18), а  $E_k$  — энергия стационарного состояния  $k$  невозмущенной системы. Аналогично уравнение (4) принимает вид

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) \langle p\alpha' | 2 \rangle &= \langle p\alpha' | V | 1 \rangle, \\ (E' - E_k) \langle k | 2 \rangle &= \langle k | V | 1 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Разлагая правые части по правилу умножения матриц,



получаем

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) \langle p\alpha' | 2 \rangle &= \sum_{\alpha''} \int \langle p\alpha' | V | p''\alpha'' \rangle d^3p'' \langle p''\alpha'' | 1 \rangle + \\ &+ \sum_{k''} \langle p\alpha' | V | k'' \rangle \langle k'' | 1 \rangle, \\ (E' - E_k) \langle k | 2 \rangle &= \sum_{\alpha''} \int \langle k | V | p''\alpha'' \rangle d^3p'' \langle p''\alpha'' | 1 \rangle + \\ &+ \sum_{k''} \langle k | V | k'' \rangle \langle k'' | 1 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

Вектор  $|0\rangle$  по-прежнему дается выражением (19), так что уравнение (39) может быть записано в виде

$$(W' - W) \langle p\alpha' | 1 \rangle = h^{\frac{3}{2}} \langle p\alpha' | V | p^0\alpha^0 \rangle, \quad (42)$$

$$(E' - E_k) \langle k | 1 \rangle = h^{\frac{3}{2}} \langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle. \quad (43)$$

Можно предположить, что матричные элементы  $\langle k' | V | k'' \rangle$  величины  $V$  равны нулю; в самом деле, эти матричные элементы для рассматриваемого явления несущественны, а если бы они не равнялись нулю, то это означало бы просто, что состояния поглощения  $k$  не выбраны надлежащим образом. Далее, мы предположим, что матричные элементы  $\langle p'\alpha' | V | p''\alpha'' \rangle$  имеют второй порядок малости, если принять, что матричные элементы  $\langle k' | V | p''\alpha'' \rangle$  и  $\langle p'\alpha' | V | k'' \rangle$  имеют первый порядок малости. Это предположение будет оправдано в случае фотонов в § 64. Из уравнений (43) и (42) мы заключаем, что величина  $\langle k | 1 \rangle$  будет первого порядка малости, если только  $E'$  не лежит близко к одному из дискретных уровней энергии  $E_k$ , и что величина  $\langle p\alpha' | 1 \rangle$  будет второго порядка малости. Как это вытекает из первого уравнения (41), значение  $\langle p\alpha' | 2 \rangle$  с точностью до второго порядка равно

$$(W' - W) \langle p\alpha' | 2 \rangle = h^{\frac{3}{2}} \sum_{k''} \langle p\alpha' | V | k'' \rangle \langle k'' | V | p^0\alpha^0 \rangle \frac{1}{E' - E_{k''}}.$$

Полная поправка второго порядка к волновой функции, именно,  $\langle p\alpha' | 1 \rangle + \langle p\alpha' | 2 \rangle$ , удовлетворяет уравнению  $(W' - W) \{ \langle p\alpha' | 1 \rangle + \langle p\alpha' | 2 \rangle \} =$

$$= h^{\frac{3}{2}} \left\{ \langle p\alpha' | V | p^0\alpha^0 \rangle + \sum_k \frac{\langle p\alpha' | V | k \rangle \langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle}{E' - E_k} \right\}.$$

Это уравнение имеет вид (23), если только  $\alpha'$  таково, что  $W' > mc^2$ . Последнее неравенство означает, что выбор  $\alpha'$  в качестве конечного состояния рассеивателя не противоречит закону сохранения энергии. Мы можем поэтому заключить из общего результата (37), что коэффициент рассеяния равен

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \left| \langle p' \alpha' | V | p^0 \alpha^0 \rangle + \sum_k \frac{\langle p' \alpha' | V | k \rangle \langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle}{E' - E_k} \right|^2. \quad (44)$$

Таким образом, можно считать, что рассеяние состоит из двух частей; из части, происходящей от матричного элемента  $\langle p' \alpha' | V | p^0 \alpha^0 \rangle$  энергии возмущения, и из части, происходящей от матричных элементов  $\langle p' \alpha' | V | k \rangle$  и  $\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle$ . Правая часть, совпадающая с ранее полученным результатом (38), может быть названа прямым рассеянием. Вторую часть можно рассматривать как происходящую от поглощения падающей частицы в некоторое состояние  $k$ , за которым непосредственно следует испускание в другом направлении; эта часть аналогична переходу через промежуточные состояния, рассмотренному в § 44. Тот факт, что нужно сложить оба члена прежде, чем образовать квадрат модуля, означает наличие интерференции между двумя типами рассеяния. Экспериментально разделить оба типа рассеяния невозможно, и различие между ними является лишь математическим.

## § 52. Резонансное рассеяние

Предположим, что энергия падающей частицы меняется непрерывно, а начальное состояние рассеивателя  $\alpha^0$  фиксировано, так что полная энергия  $E'$  или  $H'$  меняется непрерывно. Формула (44) показывает, что если  $E'$  приближается к значению одного из дискретных уровней  $E_k$ , то рассеяние становится очень большим. Согласно (44) рассеяние должно было бы быть даже бесконечным, когда  $E'$  в точности равно одному из  $E_k$ . Бесконечный коэффициент рассеяния, разумеется, физически невозможен, так что мы должны заключить, что приближение, использованное при выводе (44), перестает быть законным, когда  $E'$  близко к  $E_k$ . Для того чтобы исследовать рассеяние в этом случае, мы должны вернуться к точному уравнению

$$(E' - E) | H' \rangle = V | H' \rangle$$

(т. е. к уравнению (2) § 43, в котором  $E'$  написано вместо  $H'$ ) и воспользоваться для нахождения приближенного решения другим методом. Точное уравнение, выраженное через представители, имеет вид

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) \langle p\alpha' | H' \rangle &= \sum_{\alpha''} \int \langle p\alpha' | V | p''\alpha'' \rangle d^3p'' \langle p''\alpha'' | H' \rangle + \\ &+ \sum_{k''} \langle p\alpha' | V | k'' \rangle \langle k'' | H' \rangle, \\ (E' - E_k) \langle k | H' \rangle &= \sum_{\alpha''} \int \langle k | V | p''\alpha'' \rangle d^3p'' \langle p''\alpha'' | H' \rangle + \\ &+ \sum_{k''} \langle k | V | k'' \rangle \langle k'' | H' \rangle \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

аналогичный (41).

Выберем одно какое-либо  $E_k$  и рассмотрим случай, когда  $E'$  близко к нему. Большой член в коэффициенте рассеяния (44) возникает от таких матричных элементов  $V$ , которые лежат в столбце  $k$  или в строке  $k$ , т. е. от матричных элементов вида  $\langle k | V | p\alpha' \rangle$  или вида  $\langle p\alpha' | V | k \rangle$ . Рассеяние, происходящее от других матричных элементов  $V$ , имеет меньший порядок величины. Это наводит на мысль, что в точных уравнениях (45) следует в качестве приближения пренебречь всеми матричными элементами  $V$ , за исключением важнейших, которые имеют вид  $\langle p\alpha' | V | k \rangle$  или  $\langle k | V | p\alpha' \rangle$ , причем  $\alpha'$  есть такое состояние рассеивателя, что его энергия допускает, без нарушения закона сохранения энергии, рассматривать его как конечное состояние. Тогда уравнения приводятся к виду

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) \langle p\alpha' | H' \rangle &= \langle p\alpha' | V | k \rangle \langle k | H' \rangle, \\ (E' - E_k) \langle k | H' \rangle &= \sum_{\alpha'} \int \langle k | V | p\alpha' \rangle d^3p \langle p\alpha' | H' \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

причем суммирование по  $\alpha'$  производится по тем значениям этой величины, для которых  $W'$ , определяемое из (18), будет больше, чем  $mc^2$ . Эти уравнения достаточно просты, и их можно решить точно без дальнейших пренебрежений.

Из первого уравнения (46) получаем путем деления на  $W' - W$

$$\langle p\alpha' | H' \rangle = \frac{\langle p\alpha' | V | k \rangle \langle k | H' \rangle}{W' - W} + \lambda \delta(W' - W). \quad (47)$$

Мы должны выбрать величину  $\lambda$  (которая может быть функцией от  $\mathbf{p}$  и  $\alpha'$ ) так, чтобы выражение (47) представляло падающие частицы, соответствующие вектору состояния  $|0\rangle$  или  $\hbar^{3/2} |\mathbf{p}^0 \alpha^0\rangle$ , вместе с уходящими частицами.

Представитель  $\hbar^{3/2} |\mathbf{p}^0 \alpha^0\rangle$  в действительности имеет вид  $\lambda \delta(W' - W)$ , так как условия  $\alpha' = \alpha^0$  и  $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$ , при которых он не обращается в нуль, приводят к равенству

$$W' = E' - H_s(\alpha') = E' - H_s(\alpha^0) = W^0 = W.$$

Итак, выражение (47) должно иметь вид

$$\langle \mathbf{p} \alpha' | H' \rangle = \hbar^{3/2} \langle \mathbf{p} \alpha' | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle + \\ + \langle \mathbf{p} \alpha' | V | k \rangle \langle k | H' \rangle \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi \delta(W' - W) \right\}, \quad (48)$$

а из общей формулы (37) коэффициент рассеяния будет

$$\frac{4\pi^2 W^0 W' P'}{\hbar c^4 P^0} |\langle \mathbf{p}' \alpha' | V | k \rangle|^2 |\langle k | H' \rangle|^2. \quad (49)$$

Остается определить величину  $\langle k | H' \rangle$ . Это можно сделать, подставив во второе уравнение (46) выражение (48) для  $\langle \mathbf{p} \alpha' | H' \rangle$ . Мы получим

$$(E' - E_k) \langle k | H' \rangle = \hbar^{3/2} \langle k | V | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle + \\ + \langle k | H' \rangle \sum_{\alpha'} \int |\langle k | V | \mathbf{p} \alpha' \rangle|^2 \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi \delta(W' - W) \right\} d^3 p = \\ = \hbar^{3/2} \langle k | V | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle + \langle k | H' \rangle (a - ib),$$

где

$$a = \sum_{\alpha'} \int |\langle k | V | \mathbf{p} \alpha' \rangle|^2 \frac{d^3 p}{W' - W} \quad (50)$$

и

$$b = \pi \sum_{\alpha'} \int |\langle k | V | \mathbf{p} \alpha' \rangle|^2 \delta(W' - W) d^3 p = \\ = \pi \sum_{\alpha'} \iiint |\langle k | V | P \omega \chi \alpha' \rangle|^2 \delta(W' - W) P^2 dP \sin \omega d\omega d\chi = \\ = \pi \sum_{\alpha'} P' W' c^{-2} \iint |\langle k | V | P' \omega \chi \alpha' \rangle|^2 \sin \omega d\omega d\chi. \quad (51)$$

Таким образом,

$$\langle k | H' \rangle = \hbar^{3/2} \langle k | V | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle \frac{1}{E' - E_k - a + ib}. \quad (52)$$

Заметим, что  $a$  и  $b$  вещественны и  $b$  положительно. Подстановка этого значения  $\langle k | H' \rangle$  в уравнение (49) приводит к следующему выражению для коэффициента рассеяния:

$$\frac{4\pi^2\hbar^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \frac{|\langle p\alpha' | V | k \rangle|^2 |\langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle|^2}{(E' - E_k - a)^2 + b^2}. \quad (53)$$

Можно получить полное эффективное сечение, если проинтегрировать (53) по всем направлениям рассеяния, т. е. проинтегрировать по всем направлениям вектора  $\mathbf{p}'$  с фиксированной абсолютной величиной  $P'$  и затем просуммировать по всем  $\alpha'$ , которые следует учитывать, т. е. по тем значениям  $\alpha'$ , для которых  $W' > mc^2$ . При помощи (51) находим для полного сечения выражение

$$\frac{4\pi\hbar^2 W^0}{c^2 P^0} \frac{b |\langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle|^2}{(E' - E_k - a)^2 + b^2}. \quad (54)$$

Если предположить, что величина  $E'$  меняется непрерывно, проходя через значение  $E_k$ , то главное изменение в (53) или (54) вызывается малым знаменателем  $(E' - E_k - a)^2 + b^2$ . Если пренебречь зависимостью от  $E'$  других множителей в (53) или (54), то максимальное рассеяние будет иметь место, когда  $E'$  равно  $E_k + a$ , и рассеяние будет половиной максимального, когда  $E$  отличается от этого значения на величину  $b$ . Сильное рассеяние, возникающее при таких энергиях падающей частицы, когда  $E'$  становится приблизительно равным  $E_k$ , приводит к появлению линии поглощения. Центр линии смещен на величину  $a$  от резонансной энергии налетающей частицы, т. е. от той энергии частицы, при которой полная энергия системы в точности равнялась бы  $E_k$ ; величина  $b$  иногда называется полушириной линии.

### § 53. Испускание и поглощение

Чтобы исследовать испускание и поглощение, нужно рассматривать нестационарные состояния системы и пользоваться методом возмущения § 44. Для определения коэффициента спонтанного испускания мы должны выбрать начальное состояние, в котором частица поглощена (это состояние соответствует вектору  $|k\rangle$ ) и найти вероятность того, что в некоторый более поздний момент времени ча-

стица будет уходить на бесконечность с определенным импульсом. Здесь можно применить метод § 46. Из выражения (39) § 46 видно, что вероятность такого испускания частицы в некотором направлении  $\omega'\chi'$ , после которого рассеиватель остается в состоянии  $\alpha'$ , рассчитанная на единицу времени и единичный интервал  $\omega\chi$ , равна

$$2\pi\hbar^{-1} |\langle W'\omega'\chi'\alpha' | V | k \rangle|^2. \quad (55)$$

При этом  $\alpha'$  предполагается таким, что энергия частицы  $W'$ , определяемая из (18), больше  $mc^2$ . Для значений  $\alpha'$ , не удовлетворяющих этому условию, испускание невозможно. Матричный элемент  $\langle W'\omega'\chi'\alpha' | V | k \rangle$  относится к представлению, в котором  $W$ ,  $\omega$ ,  $\chi$  и  $\alpha$  диагональны, а весовая функция равна единице. Матричные элементы  $V$ , рассмотренные в предыдущих трех параграфах, относились к представлению, в котором  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  диагональны при весовой функции, равной единице, или  $P$ ,  $\omega$ ,  $\chi$  диагональны при весовой функции  $P^2 \sin \omega$ . Они относятся, тем самым, к представлению, в котором  $W$ ,  $\omega$ ,  $\chi$  диагональны при весовой функции  $\frac{dP}{dW} \cdot P^2 \sin \omega = \frac{WP}{c^2} \sin \omega$ . Таким образом, матричный элемент  $\langle W'\omega'\chi'\alpha' | V | k \rangle$  в выражении (55) равен умноженному на  $\left(\frac{W'P'}{c^2} \sin \omega'\right)^{1/2}$  нашему предыдущему матричному элементу  $\langle W'\omega'\chi'\alpha' | V | k \rangle$  или  $\langle p'\alpha' | V | k \rangle$ , так что выражение (55) равно

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{W'P'}{c^2} |\langle p'\alpha' | V | k \rangle|^2 \sin \omega'.$$

Вероятность испускания в единичный телесный угол в единицу времени с одновременным переходом рассеивателя в состояние  $\alpha'$  равна

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{W'P'}{c^2} |\langle p'\alpha' | V | k \rangle|^2. \quad (56)$$

Для того чтобы получить полную вероятность испускания частицы в единицу времени во всевозможных направлениях при всевозможных конечных состояниях рассеивателя, нужно проинтегрировать (56) по всем углам  $\omega'\chi'$  и просуммировать по всем состояниям  $\alpha'$ , энергия которых  $H_s(\alpha')$  такова, что  $H_s(\alpha') + mc^2 \leq E_k$ . Результат в точности равен  $2b/\hbar$ , где  $b$  определено по (51). Таким образом, *имеется*

*простое соотношение между полным коэффициентом испускания и полушириной линии поглощения.*

Рассмотрим теперь поглощение. Мы должны взять начальное состояние, в котором частица наверняка не поглощена, а налетает с определенным импульсом. Вектор, соответствующий начальному состоянию, должен поэтому иметь вид (19). Нужно определить вероятность поглощения частицы спустя время  $t$ . Поскольку наше конечное состояние  $k$  не принадлежит к сплошному спектру, мы не можем непосредственно использовать выражение (39) § 46. Однако если мы возьмем

$$|0\rangle = |p^0\alpha^0\rangle \quad (57)$$

в качестве вектора, соответствующего начальному состоянию, то рассуждения §§ 44 и 46, которые привели к уравнению (36), будут по-прежнему применимы. Они показывают, что вероятность поглощения частицы в состояние  $k$  спустя время  $t$  равна

$$2 |\langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle|^2 \frac{1 - \cos \frac{(E_k - E')t}{\hbar}}{(E_k - E')^2}.$$

Это соответствует распределению падающих частиц с плотностью  $h^{-3}$  ввиду отсутствия в (57) множителя  $h^{3/2}$ , имеющегося в (19). Вероятность поглощения спустя время  $t$  при условии, что одна падающая частица пересекает единичную площадку в единицу времени, равна

$$\frac{2h^3 W^0}{c^2 p^0} |\langle k | V | p^0\alpha^0 \rangle|^2 \frac{1 - \cos (E_k - E')t/\hbar}{(E_k - E')^2}. \quad (58)$$

Для того чтобы получить коэффициент поглощения, мы должны считать, что падающие частицы не имеют все строго одну и ту же энергию  $W^0 = E' - H_s(\alpha^0)$ , а имеют распределение по энергии около точного значения  $E_k - H_s(\alpha^0)$ , необходимого для поглощения. Если пучок падающих частиц таков, что одна частица пересекает единичную площадку в единицу времени в единичном интервале энергии, то вероятность поглощения спустя время  $t$  будет даваться интегралом (58) по  $E'$ . Этот интеграл может быть вычислен таким же образом, как интеграл (37) в § 46, и

будет равен

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0}{c^2 P^0} |\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle|^2.$$

Вероятность поглощения в единицу времени при условии, что в падающем пучке одна частица пересекает единичную площадку за единицу времени в единичном интервале энергии, равна, следовательно,

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0}{c^2 P^0} |\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle|^2, \quad (59)$$

что и представляет собой коэффициент поглощения.

Следует отметить связь между коэффициентом поглощения и испускания (59) и (56) и коэффициентом резонансного рассеяния, рассчитанного в предыдущем параграфе. Если падающий пучок не состоит из частиц с одной и той же энергией, но представляет собой такое распределение частиц, что число частиц на единичный интервал энергии, пересекающих единичную площадку на единицу времени, равно единице, то полное число частиц, налетающих с энергиями вблизи линии поглощения и испытывающих рассеяние, будет равно интегралу от (54) по  $E'$ . Если пренебречь зависимостью числителя в (54) от  $E'$ , то этот интеграл в силу равенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{(E' - E_k - \alpha)^2 + b^2} dE' = \pi$$

будет в точности равен (59). Значит, *полное число рассеянных частиц в окрестности линии поглощения равно полному числу поглощенных частиц*. Мы можем поэтому рассматривать все эти рассеянные частицы как поглощенные и затем снова испущенные в другом направлении. Далее, число таких частиц с энергией в окрестности линии поглощения, которые испытывают рассеяние в единичный телесный угол вблизи направления  $p'$ , причем рассеиватель остается в состоянии  $\alpha'$ , выражается интегралом по  $E'$  от величины (53). Этот интеграл вычисляется таким же образом и равен

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \frac{\pi}{b} |\langle p' \alpha' | V | k \rangle|^2 |\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle|^2.$$



Это как раз равно коэффициенту поглощения (59), умноженному на коэффициент испускания (56) и деленному на полный коэффициент испускания  $2b/h$ . Полученный результат согласуется с точкой зрения, рассматривающей резонансно рассеянные частицы как поглощенные и вновь испущенные, причем процессы испускания и поглощения статистически независимы. Действительно, эта точка зрения приводит к тому, что доля от всего числа поглощенных частиц, которая вновь испускается в единичном телесном угле около данного направления, как раз равна коэффициенту испускания в данном направлении, разделенному на полный коэффициент испускания.

## ГЛАВА IX

### СИСТЕМЫ, СОДЕРЖАЩИЕ НЕСКОЛЬКО ОДИНАКОВЫХ ЧАСТИЦ

#### § 54. Симметричные и антисимметричные состояния

Если система в атомной физике содержит некоторое число частиц одного сорта, например некоторое число электронов, то эти частицы абсолютно неотличимы друг от друга. Перестановка двух таких частиц не приводит ни к каким наблюдаемым изменениям. Это обстоятельство порождает в квантовой механике некоторые специфические явления, не имеющие аналога в классической теории. Эти явления связаны с тем, что в квантовой механике может произойти переход, представляющий собой всего лишь перестановку одинаковых частиц, а такой переход не может быть обнаружен экспериментально. Удовлетворительная теория должна, очевидно, считать два экспериментально-неразличимых состояния за одно и то же и отрицать, что произошел какой-либо переход, когда две одинаковые частицы поменялись местами. Мы увидим, что можно переформулировать теорию таким образом, чтобы это так и было.

Допустим, что имеется система, содержащая  $n$  одинаковых частиц. Мы можем выбрать в качестве динамических переменных набор переменных  $\xi_1$ , описывающих первую частицу, соответствующий набор  $\xi_2$ , описывающих вторую частицу, и т. д. до  $\xi_n$ , описывающих  $n$ -ю частицу. Переменные  $\xi_r$  будут коммутировать с  $\xi_s$  при  $r \neq s$ . (Могут понадобиться некоторые дополнительные переменные, описывающие то, что входит в состав системы сверх  $n$  одинаковых частиц, но в данной главе не обязательно вводить их явно.) Оператор Гамильтона, описывающий движение системы, будет выражаться функцией от  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ . Тот факт, что частицы являются одинаковыми, требует, чтобы оператор Гамильтона был симметричной функцией от  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ ,

т. е. он не должен меняться, если производится взаимная перестановка наборов переменных  $\xi_r$ , или вообще любая их перестановка. Действительно, любая величина, имеющая физическое значение, должна быть симметричной функцией от переменных  $\xi$ .

Пусть  $|a_1\rangle, |b_1\rangle \dots$  — кет-векторы состояния для первой частицы, рассматриваемой как отдельная динамическая система. Соответственно  $|a_2\rangle, |b_2\rangle \dots$  — кет-векторы состояния для второй частицы, взятой в отдельности, и т. д. Мы можем получить вектор состояния для ансамбля частиц, взяв произведение векторов, относящихся к каждой из частиц в отдельности, например

$$|a_1\rangle |b_2\rangle |c_3\rangle \dots |g_n\rangle = |a_1 b_2 c_3 \dots g_n\rangle, \quad (1)$$

в соответствии с обозначениями (65) § 20. Вектор (1) соответствует частному виду состояния для ансамбля частиц, который может быть описан так, что каждая частица находится в своем собственном состоянии, соответствующем своему множителю в левой части выражения (1). Общий вектор состояния системы частиц имеет вид суммы или интеграла векторов, аналогичных (1), и соответствует состоянию системы, относительно которого нельзя говорить, что каждая частица находится в своем собственном состоянии, а можно лишь говорить, что каждая частица отчасти находится в каждом из нескольких состояний, причем имеется корреляция с другими частицами, находящимися отчасти в различных состояниях. Если векторы  $|a_1\rangle, |b_1\rangle, \dots$  представляют собой совокупность базисных векторов для первой частицы, то векторы  $|a_2\rangle, |b_2\rangle, \dots$  будут совокупностью базисных векторов для второй частицы и т. д., и, наконец, векторы (1) будут совокупностью базисных векторов для системы, т. е. для ансамбля частиц. Мы назовем представление, даваемое для системы такими базисными векторами, *симметричным представлением*, так как в нем все частицы рассматриваются на равных основаниях.

В выражении (1) можно переставить векторы первых двух частиц и получить другой вектор системы, именно

$$|b_1\rangle |a_2\rangle |c_3\rangle \dots |g_n\rangle = |b_1 a_2 c_3 \dots g_n\rangle.$$

Вообще мы можем поменять ролями первые две частицы в любом векторе системы (ансамбля частиц) и получить другой вектор системы. Процесс взаимной перестановки

(транспозиции) первых двух частиц представляет собой оператор, который может применяться к вектору состояния системы и, очевидно, является линейным оператором такого типа, который рассматривался в § 7. Аналогично процесс взаимной перестановки двух частиц любой пары есть линейный оператор, и при повторном применении таких взаимных перестановок или транспозиций мы получим некоторую произвольную перестановку частиц как результат действия линейного оператора на вектор состояния системы. Перестановка называется *четной перестановкой* или *нечетной перестановкой*, смотря по тому, составлена она из четного или нечетного числа транспозиций.

Вектор  $|X\rangle$  системы называется *симметричным*, если он не изменяется при любой перестановке, т. е. если

$$P|X\rangle = |X\rangle \quad (2)$$

для любой перестановки  $P$ . Он называется *антисимметричным*, если не меняется при четной перестановке и меняет знак при нечетной, т. е. если

$$P|X\rangle = \pm |X\rangle, \quad (3)$$

где  $+$  или  $-$  берется в зависимости от того, четно или нечетно  $P$ . Состояние, соответствующее симметричному вектору, называется *симметричным состоянием*, а состояние, соответствующее антисимметричному вектору, называется *антисимметричным состоянием*. В симметричном представлении представителем симметричного вектора является симметричная функция переменных, относящихся к различным частицам, а представителем антисимметричного вектора является антисимметричная функция.

В шредингеровской картине вектор, соответствующий состоянию системы, изменяется со временем соответственно уравнению Шредингера. Если он первоначально был симметричен, то он должен все время оставаться симметричным, поскольку в силу симметричности оператора Гамильтона никакое возмущение не может нарушить симметрию. Аналогично, если вектор первоначально антисимметричен, то он должен все время оставаться антисимметричным. Итак, *состояние, являющееся первоначально симметричным, всегда остается симметричным, а состояние, первоначально антисимметричное, всегда остается антисимметричным*. Как следствие этого возникает возможность,

что для некоторых частиц в природе встречаются только симметричные состояния, а для других только антисимметричные состояния. Если бы осуществилась какая-либо из этих возможностей, то это привело бы к некоторым особым явлениям для таких частиц.

Предположим сперва, что встречаются только антисимметричные состояния. Вектор (1) не является антисимметричным и поэтому не соответствует состояниям, встречающимся в природе. Из выражения (1) мы можем, вообще говоря, образовать антисимметричный вектор, произведя всевозможные перестановки, сложив результаты, причем нужно ввести коэффициент  $-1$  перед членами, происходящими от нечетных перестановок. Таким образом получится

$$\sum_P \pm P |a_1 b_2 c_3 \dots g_n\rangle. \quad (4)$$

Знак  $+$  или  $-$  берется в зависимости от того, четна или нечетна перестановка  $P$ . Вектор (4) можно записать как определитель

$$\begin{vmatrix} |a_1\rangle & |a_2\rangle & |a_3\rangle & \dots & |a_n\rangle \\ |b_1\rangle & |b_2\rangle & |b_3\rangle & \dots & |b_n\rangle \\ |c_1\rangle & |c_2\rangle & |c_3\rangle & \dots & |c_n\rangle \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ |g_1\rangle & |g_2\rangle & |g_3\rangle & \dots & |g_n\rangle \end{vmatrix}, \quad (5)$$

и его представитель в симметричном представлении будет определителем. Вектор (4) или (5) не является общим видом антисимметричного вектора, а представляет собой простейший случай. Он соответствует состоянию системы, о котором можно сказать, что некоторые одночастичные состояния, именно состояния  $a, b, c, \dots, g$ , заняты, но нельзя сказать, какая именно частица в каком состоянии; каждая частица может в равной мере находиться в любом состоянии. Если два из одночастичных состояний  $a, b, c, \dots, g$  являются одинаковыми, то вектор (4) или (5) обращается в нуль и не соответствует какому-либо состоянию системы. Таким образом, *две частицы не могут быть в одном и том же состоянии.*

В более общей форме можно сказать, что *занятые состояния должны быть все линейно независимы*, иначе (4) и (5) обращаются в нуль. Это очень важная характеристика частиц, для которых в природе встречаются только антисимметричные состояния. Она приводит к особой статистике, которая впервые была изучена Ферми, и поэтому мы будем называть частицы, для которых в природе встречаются только антисимметричные состояния, *фермионами*.

Предположим теперь, что в природе встречаются только симметричные состояния. Вектор (1) не является симметричным, за исключением того случая, когда все одночастичные состояния  $a, b, c, \dots, g$  одинаковы, но мы всегда можем получить из него симметричный вектор, выполняя всевозможные перестановки и складывая результаты так, чтобы получить

$$\sum_P P |a_1 b_2 c_3 \dots g_n\rangle. \quad (6)$$

Вектор (1) не является общим видом симметричного вектора, а представляет собой простейший случай. Он соответствует состоянию системы, о котором можно сказать, что определенные одночастичные состояния заняты, именно  $a, b, c, \dots, g$ , но нельзя сказать, какая частица в каком состоянии. Теперь возможно, чтобы два или более состояний были одинаковыми, так что две или более частиц могут быть в одном состоянии. Несмотря на это, статистика таких частиц отличается от обычной статистики классической теории. Новая статистика была впервые изучена Бозе, и поэтому мы будем называть частицы, для которых в природе встречаются только симметричные состояния, *бозонами*.

Отличие статистики Бозе от обычной статистики можно представить себе, рассматривая частный случай — случай двух частиц и всего лишь двух независимых состояний  $a$  и  $b$  для частицы. Согласно классической механике, если система из двух частиц находится в состоянии термодинамического равновесия при высокой температуре, то каждая частица может быть с равной вероятностью в любом из этих состояний. Следовательно, имеется вероятность  $1/4$ , что обе частицы находятся в состоянии  $a$ , вероятность  $1/4$ , что обе частицы находятся в состоянии  $b$  и вероятность  $1/2$ , что в каждом состоянии находится одна частица. В квантовой

теории имеется три независимых симметричных состояния пары частиц; они соответствуют симметричным векторам  $|a_1\rangle|a_2\rangle$ ,  $|b_1\rangle|b_2\rangle$  и  $|a_1\rangle|b_2\rangle + |a_2\rangle|b_1\rangle$ , и их можно характеризовать как случаи, когда обе частицы находятся в состоянии  $a$ , обе находятся в состоянии  $b$ , и по одной находится в каждом из состояний  $a$  и  $b$ . Как было показано в § 33, в термодинамическом равновесии при высокой температуре эти три состояния равновероятны, так что имеется вероятность  $1/3$ , что обе частицы будут в состоянии  $a$ , вероятность  $1/3$ , что обе частицы будут в состоянии  $b$ , и вероятность  $1/3$ , что в каждом из состояний  $a$  и  $b$  будет по одной частице. Таким образом, *по статистике Бозе вероятность нахождения двух частиц в одном и том же состоянии больше, чем по классической статистике*. Статистика Бозе отличается от классической статистики в противоположную сторону по сравнению со статистикой Ферми, для которой вероятность нахождения двух частиц в одном и том же состоянии равна нулю.

При построении теории атома в духе, указанном в начале § 38, нужно для достижения согласия с экспериментом считать, что два электрона никогда не бывают в одном и том же состоянии. Это правило известно как *принцип Паули*. Оно показывает, что *электроны являются фермионами*. Планковский закон излучения показывает, что *фотоны являются бозонами*, так как только статистика Бозе для фотонов приводит к закону Планка. Аналогично для каждого сорта других частиц, известных в физике, существуют экспериментальные данные, показывающие, что эти частицы являются либо фермионами, либо бозонами. Протоны, нейтроны, позитроны являются фермионами,  $\alpha$ -частицы являются бозонами. По-видимому, все частицы, существующие в природе, являются либо фермионами, либо бозонами, и таким образом, практически встречаются только антисимметричные или только симметричные состояния системы одинаковых частиц. Математически возможны и другие более сложные виды симметрии, но они не соответствуют ни одной из известных частиц. В теории, допускающей только антисимметричные частицы или только симметричные состояния для данного вида частиц, невозможно провести различие между двумя состояниями, отличающимися только перестановкой частиц, как что переходы, о которых шла речь в начале параграфа, действительно отсутствуют.

### § 55. Перестановки как динамические переменные

Построим теперь общую теорию систем, содержащих  $n$  одинаковых частиц для случая, когда допускаются состояния с любыми свойствами симметрии, а не только симметричные или антисимметричные. Состояние в общем случае не будет симметричным или антисимметричным и не будет выражаться линейной комбинацией симметричного и антисимметричного состояний, если только  $n > 2$ . Эта теория не приложима непосредственно к какому-либо сорту частиц, встречающихся в природе, но тем не менее она полезна для разработки приближенного метода рассмотрения ансамбля электронов, как будет показано в § 58.

Мы видели, что каждая перестановка  $P$  системы  $n$  частиц является линейным оператором, действующим на любой вектор системы частиц. Следовательно, мы можем рассматривать  $P$  как динамическую переменную в нашей системе  $n$  частиц. Имеется  $n!$  перестановок, каждую из которых можно рассматривать как динамическую переменную. Одна из них, скажем,  $P_1$ , есть тождественная перестановка, равная единице. Произведение любых двух перестановок есть третья перестановка, и следовательно, любая функция перестановок приводится к линейной. Каждая перестановка  $P$  имеет обратную  $P^{-1}$ , удовлетворяющую

$$PP^{-1} = P^{-1}P = P_1 = 1.$$

Перестановка  $P$ , примененная к бра-вектору системы  $\langle X |$ , дает другой бра-вектор  $P \langle X |$ . Если  $P$  применить к обоим множителям произведения  $\langle X | Y \rangle$ , то произведение не должно меняться, поскольку оно является числом, не зависящим от порядка частиц. Значит,

$$(P \langle X |) P | Y \rangle = \langle X | Y \rangle,$$

откуда

$$P \langle X | = \langle X | P^{-1}. \quad (7)$$

Далее,  $P \langle X |$  является сопряженным от  $P | X \rangle$ , и поэтому равно  $\langle X | \bar{P}$ , что, согласно (7), дает

$$\bar{P} = P^{-1}. \quad (8)$$

Следовательно, перестановка, вообще говоря, не является вещественной динамической переменной, поскольку ее сопряженная равна обратной.



Любая перестановка чисел  $1, 2, 3, \dots, n$  может быть выражена с помощью циклов, например для  $n = 8$

$$P_a = (143)(27)(58)(6), \quad (9)$$

где каждое число в скобке заменяется последующим, а последнее число в скобке заменяется на первое. Следовательно,  $P_a$  переводит числа  $1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8$  в  $4\ 7\ 1\ 3\ 8\ 6\ 2\ 5$ . Тип некоторой перестановки определяется разбиением числа  $n$  на части, равные количеству чисел в скобках. Так, тип  $P_a$  определяется разбиением  $8 = 3 + 2 + 2 + 1$ . Перестановки одного и того же типа, т. е. соответствующие одному и тому же разбиению, мы будем называть *подобными*. Так, например, перестановка в (9) подобна следующей:

$$P_b = (871)(35)(46)(2). \quad (10)$$

Все  $n!$  возможных перестановок могут быть подразделены на серии подобных перестановок; каждая серия называется классом. Перестановка  $P_1 = 1$  сама по себе образует класс. Каждая перестановка подобна обратной себе.

Если две перестановки  $P_a$  и  $P_b$  подобны, то одна из них  $P_b$  может быть получена путем применения некоторой перестановки  $P_x$  к другой  $P_a$ . Так, в наших примерах (9), (10) мы можем взять в качестве  $P_x$  перестановку, переводящую  $1\ 4\ 3\ 2\ 7\ 5\ 8\ 6$  в  $8\ 7\ 1\ 3\ 5\ 4\ 6\ 2$ , т. е. перестановку

$$P_x = (18623)(475).$$

Различные способы записи  $P_a$  и  $P_b$  в виде циклов приводят к различным  $P_x$ . Каждое из этих  $P_x$ , примененное к произведению  $P_a | X \rangle$ , переводит его в  $P_b \cdot P_x | X \rangle$ , т. е.

$$P_x P_a | X \rangle = P_b P_x | X \rangle.$$

Следовательно,

$$P_b = P_x P_a P_x^{-1}, \quad (11)$$

что выражает условие подобия  $P_a$  и  $P_b$  в виде алгебраического уравнения. Существование хотя бы одного  $P_x$ , удовлетворяющего соотношению (11), является достаточным условием для доказательства подобия  $P_a$  и  $P_b$ .

## § 56. Перестановки как интегралы движения

Любая симметричная функция  $V$  динамических переменных всех частиц не изменяется при любой перестановке  $P$ , так что применение  $P$  к произведению  $V | X \rangle$  высказы-

ется только на множителе  $|X\rangle$ , так что

$$PV|X\rangle = VP|X\rangle,$$

значит,

$$PV = VP \quad (12)$$

откуда видно, что *симметричная функция динамических переменных коммутирует с любой перестановкой*. Оператор Гамильтона является симметричной функцией динамических переменных, так что он коммутирует с любой перестановкой. Отсюда следует, что *каждая перестановка является интегралом движения*. Это имеет место даже в том случае, если оператор Гамильтона не постоянен. Если  $|Xt\rangle$  является некоторым решением уравнения Шредингера, то  $P|Xt\rangle$  есть также решение. Если для некоторой системы в квантовой механике известен интеграл движения  $\alpha$ , то мы знаем, что первоначальное значение  $\alpha$ , равное  $\alpha'$ , сохраняется все время, так что можно приписать различным состояниям различные  $\alpha'$  и таким образом классифицировать состояния. Однако эту процедуру нельзя применить непосредственно в случае, когда имеется несколько интегралов движения, не коммутирующих друг с другом (как в случае с нашими перестановками  $P$ ), поскольку нельзя, вообще говоря, приписать для произвольного состояния числовые значения всем  $\alpha$  одновременно. Рассмотрим сначала случай системы, оператор Гамильтона которой не содержит времени явно. Существование интегралов движения  $\alpha$ , не коммутирующих друг с другом, есть признак вырожденности системы. Действительно, для невырожденной системы оператор Гамильтона сам по себе образует полный набор коммутирующих переменных и, следовательно, по теореме 2 § 19 каждое из  $\alpha$  является функцией  $H$  и поэтому коммутирует с другими  $\alpha$ . Мы должны теперь искать такую функцию  $\beta$  от величины  $\alpha$ , которая имела бы одно и то же численное значение  $\beta'$  для всех состояний, относящихся к одному и тому же уровню энергии  $H'$ , чтобы можно было использовать  $\beta$  для классификации уровней энергии системы. Требование для  $\beta$  можно выразить, сказав, что  $\beta$  должно быть функцией от  $H$ , и поэтому должно коммутировать с любой динамической переменной, коммутирующей с  $H$ , т. е. с любым интегралом движения.

Если величины  $\alpha$  являются единственными интегралами движения или если они образуют набор, коммутирующий со

всеми другими независимыми интегралами движения, наша задача сводится к нахождению функции  $\beta$  от величин  $\alpha$ , которая коммутировала бы со всеми  $\alpha$ . Тогда мы можем приписать численные значения  $\beta$  величинам  $\beta$  каждому уровню энергии. Если можно найти несколько таких функций  $\beta$ , они должны все коммутировать друг с другом, так что мы можем приписать им всем одновременно численные значения. Таким образом, мы получаем классификацию уровней энергии. Если оператор энергии содержит время явно, то нельзя говорить об уровнях энергии, но величины  $\beta$  будут по-прежнему давать удобную классификацию состояний.

Воспользуемся этим методом при рассмотрении наших перестановок  $P$ . Нужно найти функцию  $\chi$  от  $P$  такую, что  $P\chi P^{-1} = \chi$  для любого  $P$ . Очевидно, что возможным  $\chi$  является  $\sum P_c$ , сумма всех перестановок определенного класса  $c$ , т. е. сумма всех подобных перестановок, так как сумма  $\sum P P_c P^{-1}$  должна состоять из тех же перестановок, суммируемых в другом порядке. Для каждого класса будет одно такое  $\chi$ . Далее, не может быть других независимых  $\chi$ , так как произвольная функция от  $P$  может быть выражена как линейная функция этих перестановок с численными коэффициентами, и она будет коммутировать со всеми  $P$  только в том случае, если коэффициенты при подобных  $P$  будут всегда одинаковыми. Таким путем получаются все  $\chi$ , которые могут быть использованы для классификации состояний. Удобно определить каждое  $\chi$  как среднее, а не сумму, так что

$$\chi_c = n_c^{-1} \sum P_c,$$

где  $n_c$  — число перестановок  $P$  в классе  $c$ . Другое выражение для  $\chi_c$  имеет вид

$$\chi_c = n!^{-1} \sum_P P P_c P^{-1}, \quad (13)$$

где сумма распространяется на все  $n!$  перестановок  $P$ ; легко проверить, что сумма содержит каждый член класса  $c$  одинаковое число раз. Для каждой перестановки  $P$  имеется одно  $\chi$ , скажем  $\chi(P)$ , равное среднему от всех перестановок, подобных  $P$ . Одно из  $\chi$  есть  $\chi(P_1) = 1$ .

Интегралы движения  $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m$ , полученные таким образом, будут каждый иметь определенное численное значение для каждого стационарного состояния системы в том

случае, когда оператор Гамильтона не содержит времени явно. В общем случае они также могут быть использованы для классификации состояний, причем каждому набору допустимых численных значений  $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi'_m$  величин  $\chi$  будет соответствовать одна совокупность состояний. Так как  $\chi$  всегда являются интегралами движения, эти совокупности состояний будут *обособленными или взаимно исключающими* в том смысле, что переходы из состояний одной группы в состояния другой группы никогда не происходят.

Допустимые наборы значений  $\chi'$ , которые можно придать величинам  $\chi$ , ограничены тем, что существуют алгебраические соотношения между величинами  $\chi$ . Произведение любых двух  $\chi$ , типа  $\chi_p \cdot \chi_q$ , очевидно, может быть выражено в виде линейной функции от  $P$ , а так как оно коммутирует с любым  $P$ , то должно выражаться линейной функцией  $\chi$ , так что

$$\chi_p \chi_q = a_1 \chi_1 + a_2 \chi_2 + \dots + a_m \chi_m, \quad (14)$$

где  $a$  — числа. Всякие численные значения  $\chi'$ , которые приписываются величинам  $\chi$ , должны быть собственными значениями  $\chi$  и должны удовлетворять тем же алгебраическим уравнениям. Каждому решению  $\chi'$  этих уравнений соответствует один обособленный набор состояний. Одним из таких решений является, очевидно,  $\chi'_p = 1$  для всех  $\chi_p$ ; оно дает совокупность симметричных состояний. Другое очевидное решение, дающее совокупность антисимметричных состояний, есть  $\chi'_p = \pm 1$ , где знак  $+$  или  $-$  берется в зависимости от того, являются ли перестановки в классе  $p$  четными или нечетными. Другие решения могут быть получены в любом частном случае с помощью обычных алгебраических методов, так как коэффициенты  $a$  в выражении (14) могут быть определены непосредственно при рассмотрении типов перестановок, к которым относятся рассматриваемые  $\chi$ . Любое решение представляет собой, с точностью до некоторого множителя, то, что называется в теории групп *характером* группы перестановок. Величины  $\chi$  все являются вещественными динамическими переменными, так как каждое  $P$  и его комплексно-сопряженное  $P^{-1}$  являются подобными перестановками и по определению  $\chi$  они входят в  $\chi$  в виде суммы, так что  $\chi'$  должны быть все вещественными числами.

Число возможных решений уравнений (14) может быть легко определено, так как оно должно быть равно числу различных собственных значений произвольной функции  $B$  от величины  $\chi$ . Функцию  $B$  можно выразить как линейную функцию от  $\chi$  с помощью уравнения (14), так что

$$B = b_1\chi_1 + b_2\chi_2 + \dots + b_m\chi_m. \quad (15)$$

Аналогично мы можем выразить каждую из величин  $B^2$ ,  $B^3$ , ...,  $B^m$  как линейную функцию от  $\chi$ . Из полученных таким образом  $m$  уравнений совместно с уравнением  $\chi(P_1) = 1$  мы можем исключить  $m$  неизвестных  $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m$ , получив в результате алгебраическое уравнение  $m$  степени относительно  $B$ .

$$B + c_1B^{m-1} + c_2B^{m-2} + \dots + c_m = 0.$$

Совокупность  $m$  решений этого уравнения дают  $m$  возможных собственных значений  $B$ , каждое из которых, согласно (15), будет линейной функцией от  $b_1, b_2, \dots, b_m$ ; коэффициенты каждой такой линейной функции являются возможными системами значений величин  $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi'_m$ . Системы значений  $\chi'$ , полученные таким образом, должны быть все различны, так как если бы различных допустимых систем величин  $\chi'$  для  $\chi$  было меньше чем  $m$ , то существовала бы такая линейная функция от  $\chi$ , все собственные значения которой были бы равны нулю. Это означает равенство нулю самой линейной функции. Но тогда величины  $\chi$  не были бы линейно независимыми. Итак, число допустимых систем значений  $\chi$  в точности равно  $m$ , что равно числу классов перестановок или числу разбиений  $n$ . Это число и есть поэтому число обособленных наборов состояний.

Все физически важные динамические переменные и все наблюдаемые величины симметричны по частицам и, следовательно, коммутируют со всеми  $P$ . Таким образом, единственными физически важными функциями  $P$  являются величины  $\chi$ . Если два состояния соответствуют векторам  $|\chi'\rangle$  и  $f(P)|\chi'\rangle$ , где  $|\chi'\rangle$  — некоторый собственный вектор операторов  $\chi$ , принадлежащий собственному значению  $\chi'$ , и  $f(P)$  — некоторая функция от  $P$  такая, что  $f(P)|\chi'\rangle \neq 0$ , то эти два состояния неразличимы и являются поэтому физически эквивалентными. Имеется определенное число  $n(\chi')$  независимых векторов, которые могут быть образованы умножением  $|\chi'\rangle$  на различные функции от  $P$ , причем это число

зависит только от  $\chi$ . Оно равно числу строк и столбцов в матричном представлении  $P$ , в котором каждое  $\chi$  равно  $\chi'$ . Если  $|\chi'\rangle$  соответствуют стационарному состоянию, то  $n(\chi')$  будет степенью его вырождения (поскольку дело касается вырождения, вызванного симметрией относительно перестановки частиц). Это вырождение не может быть устранено никаким возмущением, являющимся симметричным относительно перестановки частиц.

### § 57. Определение уровней энергии

Применим метод возмущения § 43 для определения в первом приближении уровней энергии, когда оператор Гамильтона не содержит времени явно. Предположим, что в невозмущенном стационарном состоянии системы каждая из одинаковых частиц имеет свое собственное индивидуальное состояние. При  $n$  частицах в системе мы будем иметь  $n$  таких состояний, соответствующих векторам, скажем  $|\alpha^1\rangle$ ,  $|\alpha^2\rangle$ , ...,  $|\alpha^n\rangle$ , которые будем считать ортогональными. Вектор системы имеет вид

$$|X\rangle = |\alpha_1^1\rangle |\alpha_2^2\rangle \dots |\alpha_n^n\rangle, \quad (16)$$

как и вектор (1), с той разницей, что здесь написано  $\alpha^1, \alpha^2, \dots$  вместо  $a, b, \dots$ . Применяя к нему оператор перестановки  $P$ , получим другой вектор, например

$$P|X\rangle = |\alpha_r^1\rangle |\alpha_s^2\rangle \dots |\alpha_z^n\rangle, \quad (17)$$

где  $r, s, \dots, z$  образуют некоторую перестановку чисел 1, 2, ...,  $n$ , соответствующую другому стационарному состоянию системы частиц с той же энергией. Всего имеется  $n!$  невозмущенных состояний с этой энергией, если предположить, что нет других источников вырождения. Согласно методу § 43 в таком случае, когда система вырождена, нужно рассматривать такие матричные элементы энергии возмущения  $V$ , которые относятся к двум состояниям с одной и той же энергией, т. е. матричные элементы типа  $\langle X | P_a V P_b | X \rangle$ . Они образуют матрицу из  $n!$  строк и столбцов, собственные значения которой образуют поправку первого порядка к уровням энергии.

Мы должны теперь ввести другой вид оператора перестановки, который может действовать на вектор (17), именно оператор, действующий на индексы  $\alpha$ . Обозначим этот опе-

ратор через  $P^\alpha$ . Основное различие между  $P$  и  $P^\alpha$  можно пояснить следующим образом. Рассмотрим перестановку в общем смысле, скажем, состоящую в обмене 2 и 3. Она может быть истолкована либо как перестановка объектов 2 и 3, либо как перестановка объектов в местах 2 и 3. Эти две операции дают, вообще говоря, совершенно различные результаты. Первое толкование соответствует оператору  $P$ ; объектами, о которых идет речь, являются одинаковые частицы. Перестановка во втором толковании имеет смысл только в применении к вектору вида (17), согласно которому каждая часть имеет «место», определяемое своим  $\alpha$ , или к сумме векторов вида (17). Перестановку  $P^\alpha$  можно рассматривать как обычную динамическую переменную лишь в ограниченном смысле только тогда, когда дело касается состояний, получаемых путем суперпозиции различных состояний вида (17). Как раз таким случаем является наша настоящая задача возмущения.

Мы можем образовать алгебраическую функцию от  $P^\alpha$ , которая будет оператором, действующим на вектор вида (17). В частности, можно построить величину  $\chi(P^\alpha)$ , т. е. среднее от всех  $P^\alpha$  в определенном классе  $c$ . Эта величина должна быть равна  $\chi(P_c)$ , среднему от  $P$  в том же классе, так как полный набор всех перестановок в данном классе должен, очевидно, быть тем же самым, независимо от того, переставляются ли частицы или места, в которых находятся частицы. Любое  $P$  коммутирует с любым  $P^\alpha$ , т. е.

$$P_a P_b^\alpha = P_b^\alpha P_a. \quad (18)$$

Нумеруя  $\alpha$  теми же числами 1, 2, 3, ..., что и частицы, мы установим взаимно однозначное соответствие между величинами  $\alpha$  и частицами, так что если дана некоторая перестановка  $P_\alpha$ , действующая на частицы, то можно придать смысл соответствующей перестановке  $P_\alpha^\alpha$ , действующей на  $\alpha$ . Этот смысл состоит в том, что для вектора  $|X\rangle$ , определяемого формулой (16), имеет место равенство

$$P_a^\alpha P_a |X\rangle = |X\rangle. \quad (19)$$

Так как различные векторы  $|\alpha^1\rangle, |\alpha^2\rangle, \dots$  ортогональны, то  $|X\rangle$  и  $P|X\rangle$  являются ортогональными, за исключением случая  $P = 1$ . Отсюда следует, что для любого набора

коэффициентов  $c_p$  справедливо равенство

$$\sum_p c_p \langle X | P^\alpha P_a | X \rangle = c_{p_a} \quad (20)$$

в предположении, что  $|X\rangle$  нормировано; суммирование производится по всем  $n!$  перестановкам  $P$  или  $P^\alpha$  при фиксированном  $P_a$ . Определим теперь  $V_P$  посредством формулы

$$V_P = \langle X | VP | X \rangle. \quad (21)$$

Принимая во внимание (20), мы имеем тогда, для любых двух перестановок  $P_x$  и  $P_y$

$$\begin{aligned} \langle X | P_x V P_y | X \rangle &= \langle X | V P_x P_y | X \rangle = V_{P_x P_y} = \\ &= \sum_P V_P \langle X | P^\alpha P_x P_y | X \rangle. \end{aligned}$$

Согласно (18) отсюда следует

$$\langle X | P_x V P_y | X \rangle = \sum_P V_P \langle X | P_x P^\alpha P_y | X \rangle. \quad (22)$$

Мы можем переписать этот результат в виде

$$V \approx \sum_P V_P P^\alpha, \quad (23)$$

где знак  $\approx$  означает равенство в ограниченном смысле: операторы с обеих сторон равны лишь постольку, поскольку они действуют на кет-векторы вида  $P | X \rangle$  и на сопряженные им бра-векторы.

Формула (23) показывает, что энергия возмущения  $V$  равносильна, в ограниченном смысле, линейной функции операторов перестановки  $P^\alpha$  с коэффициентами  $V_P$ , даваемыми выражением (21). Равенство в ограниченном смысле, указанном выше, является достаточным для расчета поправок к уровням энергии в первом приближении, так как в расчете участвуют только те матричные элементы  $V$ , которые даются выражением (22). Формула (23) очень удобна, так как с выражением в правой части легко иметь дело.

В качестве примера применения формулы (23) определим среднюю энергию всех тех состояний, возникающих из невозмущенного состояния (16), которые принадлежат одному обособленному набору состояний. Требуется сосчитать среднее значение  $V$  для таких состояний (17), в которых  $\chi$



имеют выбранные численные значения  $\chi'$ . Среднее собственное значение  $P_a^\alpha$  в любом из этих состояний равно среднему собственному значению  $P^\alpha P_a^\alpha (P^\alpha)^{-1}$  для произвольного  $P^\alpha$  и, следовательно, равно

$$n!^{-1} \sum_{P^\alpha} P^\alpha P_a^\alpha (P^\alpha)^{-1},$$

что равно  $\chi'(P_a^\alpha)$  или  $\chi'(P_a)$ . Следовательно, среднее собственное значение  $V$  равно  $\sum_P V_P \chi'(P)$ . Аналогичный метод может быть использован для расчета среднего собственного значения любой функции от  $V$ ; для того чтобы выполнить усреднение, нужно только заменить каждое  $P^\alpha$  на  $\chi'(P)$ .

Число уровней энергии в обособленном наборе состояний  $\chi = \chi'$ , возникающих из данного состояния невозмущенной системы, равно числу собственных значений правой части (23), совместных с уравнениями  $\chi = \chi'$ . Это число равно тому числу  $n(\chi')$ , которое было введено в конце предыдущего параграфа, и, таким образом, как раз равно степени вырождения состояний в рассматриваемом обособленном наборе.

Мы предполагали, что индивидуальные кет-векторы

$$|\alpha^1\rangle, |\alpha^2\rangle, \dots,$$

которые, согласно (16), определяют невозмущенное состояние, являются ортогональными. Теория легко может быть распространена на случай, когда некоторые из этих векторов равны, тогда как неравные векторы по-прежнему ортогональны. Некоторые перестановки  $P^\alpha$  теперь будут такими, что имеет место  $P^\alpha |X\rangle = |X\rangle$ ; это именно те перестановки, которые содержат лишь обмен местами одинаковых  $\alpha$ . Уравнение (20) будет выполняться, если производить суммирование только по тем  $P$ , которые делают  $P^\alpha |X\rangle$  различными. С этим изменением смысла  $\sum_P$  все предыдущие

уравнения останутся по-прежнему справедливыми, включая результат (23). Для рассматриваемого типа  $|X\rangle$  будут ограничения на возможные числовые значения величин  $\chi$ , например, эти величины не могут иметь таких значений, которые соответствовали бы антисимметричному вектору  $|X\rangle$ .

### § 58. Применение к электронам

Рассмотрим случай, когда одинаковые частицы являются электронами. Это означает, согласно принципу Паули, рассмотренному в § 54, что мы должны принимать во внимание только антисимметричные состояния. Необходимо теперь в явном виде учесть, что электроны имеют спин, который проявляется в наличии момента количества движения и магнитного момента. Влияние спина на движение электрона в электромагнитном поле не очень велико. Возникают добавочные силы, действующие на электрон благодаря его магнитному моменту, что требует введения дополнительных членов в оператор Гамильтона. Спиновый момент количества движения не влияет непосредственно, но он вступает в игру, когда появляются силы, стремящиеся повернуть магнитный момент, так как магнитный момент и момент количества движения всегда должны быть одинаково направлены. В отсутствие сильного магнитного поля все эти эффекты малы и имеют тот же самый порядок величины, что и релятивистские поправки, и нет необходимости принимать их во внимание в нерелятивистской теории. Важность спина состоит не в этих слабых влияниях на движение электрона, но в том, что спин дает электрону два внутренних состояния, соответствующих двум возможным значениям проекции спина на произвольное направление, что приводит к удвоению числа независимых состояний электрона. Этот факт в сочетании с принципом Паули имеет весьма важные последствия.

Имея дело с ансамблем электронов, мы встречаемся с двумя группами динамических переменных. Первая группа, которую можно назвать *орбитальными переменными*, состоит из координат  $x, y, z$  всех электронов и сопряженных им импульсов  $p_x, p_y, p_z$ . Вторая группа состоит из спиновых переменных, т. е. из определенных в § 37 величин  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  для каждого из электронов. Эти две группы переменных относятся к различным степеням свободы. Согласно §§ 20 и 21 вектор, фиксирующий состояние всей системы, может иметь вид  $|A\rangle |B\rangle$ , где  $|A\rangle$  — вектор, относящийся к одним лишь орбитальным переменным, а  $|B\rangle$  — вектор, относящийся к одним спиновым переменным, а общий вид вектора, фиксирующего состояние всей системы, представляет собой сумму или интеграл таких выражений. Такой подход

к задаче позволяет нам ввести два вида операторов перестановки. Первый, скажем  $P^x$ , применяется лишь к орбитальным переменным и действует только на множитель  $|A\rangle$  и второй, скажем  $P^\sigma$ , применяется лишь к спиновым переменным и действует только на множитель  $|B\rangle$ . Операторы  $P^x$  и  $P^\sigma$  могут быть применены к любому вектору всей системы, не обязательно к определенным частным видам векторов, как  $P^\alpha$  в предыдущем параграфе. Перестановки  $P$ , которые мы имели до сих пор, применяются ко всем динамическим переменным рассматриваемых частиц, так что в случае электронов они действуют как на орбитальные, так и на спиновые переменные. Это означает, что каждое  $P_a$  равно произведению

$$P_a = P_a^x P_a^\sigma. \quad (24)$$

Теперь можно показать необходимость учета спиновых переменных при применении принципа Паули, даже если мы пренебрегаем спиновыми силами в операторе Гамильтона. Для любого состояния, встречающегося в природе, каждое  $P_a$  должно иметь величину  $\pm 1$ ; смотря по тому, является ли данная перестановка четной или нечетной, так что из (24) следует

$$P_a^x P_a^\sigma = \pm 1. \quad (25)$$

Теория трех предыдущих параграфов становится тривиальной, если ее применять непосредственно к электронам, для которых каждая перестановка  $P_a = \pm 1$ . Мы можем, однако, применить ее к перестановкам типа  $P^x$  для электронов. Операторы  $P^\sigma$  являются интегралами движения, если пренебречь членами в операторе Гамильтона, возникающими от спиновых сил, так как при таком пренебрежении спиновые динамические переменные  $\sigma$  вообще не входят в оператор Гамильтона. Следовательно, операторы  $P^x$  также должны быть интегралами движения. Мы можем теперь ввести новые  $\chi$ , равные среднему от всех  $P^x$  в каждом классе, и утверждать, что любому допустимому набору численных значений  $\chi'$  этих величин  $\chi$  будет соответствовать обособленный набор состояний. Таким образом, существуют обособленные наборы состояний для многоэлектронных систем, даже если ограничиться только теми состояниями, которые удовлетворяют принципу Паули. Обособленность набора состояний теперь, разумеется, только приближенная,

так как операторы  $\chi$  являются интегралами движения лишь постольку, поскольку мы пренебрегаем спинowymi силами. В действительности будет существовать небольшая вероятность переходов из состояний одного набора в состояния другого набора.

Уравнение (25) дает нам простую связь между величинами  $P^x$  и  $P^y$ , которая означает, что вместо изучения динамических переменных  $P^x$  мы можем для получения всех желаемых результатов, например характеров  $\chi'$ , изучать динамические переменные  $P^y$ . Изучать  $P^y$  гораздо легче, так как имеется всего два независимых состояния каждого электрона. Наличие всего двух спинowych состояний приводит к тому, что число характеров  $\chi'$  группы перестановок спинowych переменных меньше, чем в общем случае группы перестановок, так как вектор состояния, содержащий спиновые переменные, не может быть антисимметричным более чем по двум переменным.

Изучение  $P^y$  особенно облегчается тем, что их можно выразить в виде алгебраических функций от динамических переменных  $\sigma$ . Рассмотрим величину

$$O_{12} = \frac{1}{2} \{1 + \sigma_{x1}\sigma_{x2} + \sigma_{y1}\sigma_{y2} + \sigma_{z1}\sigma_{z2}\} = \frac{1}{2} \{1 + (\sigma_1, \sigma_2)\},$$

С помощью уравнений (50) и (51) § 37 легко находим, что

$$(\sigma_1, \sigma_2)^2 = (\sigma_{x1}\sigma_{x2} + \sigma_{y1}\sigma_{y2} + \sigma_{z1}\sigma_{z2})^2 = 3 - 2(\sigma_1, \sigma_2) \quad (26)$$

и, следовательно,

$$O_{12}^2 = \frac{1}{4} \{1 + 2(\sigma_1, \sigma_2) + (\sigma_1, \sigma_2)^2\} = 1. \quad (27)$$

Далее мы находим

$$\begin{aligned} O_{12}\sigma_{x1} &= \frac{1}{2} \{\sigma_{x1} + \sigma_{x2} - i\sigma_{z1}\sigma_{y2} + i\sigma_{y1}\sigma_{z2}\}, \\ \sigma_{x2}O_{12} &= \frac{1}{2} \{\sigma_{x2} + \sigma_{x1} + i\sigma_{y1}\sigma_{z2} - i\sigma_{z1}\sigma_{y2}\} \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$O_{12}\sigma_{x1} = \sigma_{x2}O_{12}.$$

Аналогичные соотношения выполняются для  $\sigma_{y1}$  и  $\sigma_{z1}$ , так что мы имеем

$$O_{12}\sigma_1 = \sigma_2 O_{12}$$

или

$$O_{12}\sigma_1 O_{12}^{-1} = \sigma_2.$$

Отсюда мы можем получить с помощью (27)

$$O_{12}\sigma_2 O_{12}^{-1} = \sigma_1.$$

Эти перестановочные соотношения для  $O_{12}$  с  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  в точности те же самые, как для  $P_{12}^\sigma$ , т. е. для перестановки, состоящей в обмене спиновых переменных электронов 1 и 2. Следовательно, мы можем положить

$$O_{12} = cP_{12}^\sigma,$$

где  $c$  — число. Уравнение (27) показывает, что  $c = \pm 1$ . Для того чтобы определить, какое из этих значений правильно, заметим, что собственные значения  $P_{12}^\sigma$  равны 1, 1, 1,  $-1$  в соответствии с фактом существования трех независимых симметричных и одного антисимметричного состояний в спиновых переменных двух электронов. В обозначениях § 37 это состояния, представляемые тремя симметричными функциями

$$f_\alpha(\sigma'_{21})f_\alpha(\sigma'_{22}), f_\beta(\sigma'_{21})f_\beta(\sigma'_{22}), f_\alpha(\sigma'_{21})f_\beta(\sigma'_{22}) + f_\beta(\sigma'_{21})f_\alpha(\sigma'_{22})$$

и одной антисимметричной

$$f_\alpha(\sigma'_{21})f_\beta(\sigma'_{22}) - f_\beta(\sigma'_{21})f_\alpha(\sigma'_{22}).$$

Следовательно, среднее значение  $P_{12}^\sigma = \frac{1}{2}$ . Среднее собственное значение  $(\sigma_1\sigma_2)$ , очевидно, равно нулю и, следовательно, среднее собственное значение  $Q_{12} = \frac{1}{2}$ . Значит, должно быть  $c = 1$ , так что можно положить

$$P_{12}^\sigma = \frac{1}{2} \{1 + (\sigma_1, \sigma_2)\}. \quad (28)$$

Таким образом, перестановка  $P^\sigma$ , являющаяся простой транспозицией, может быть выражена в виде алгебраической функции от  $\sigma$ . Любая другая перестановка представляется произведением транспозиций, и поэтому также может быть выражена как функция от  $\sigma$ . С помощью (25) мы можем теперь выразить  $P^x$ , как алгебраическую функцию от  $\sigma$ , и исключить из рассмотрения  $P^\sigma$ . Поскольку в (25) нужно взять знак минус, когда перестановки являются транспозициями, и поскольку квадрат транспозиции равен единице, то мы имеем

$$P_{12}^x = -\frac{1}{2} \{1 + (\sigma_1, \sigma_2)\}. \quad (29)$$

Формулу (29) удобно использовать для вычисления характеров  $\chi'$ , определяющих обособленные наборы состояний. Мы имеем, например, для перестановок, состоящих из транспозиций,

$$\chi_{12} = \chi(P_{12}^*) = -\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{2}{n(n-1)} \sum_{r < t} (\sigma_r, \sigma_t) \right\}.$$

Можно ввести динамическую переменную  $s$ , описывающую величину полного спинового момента количества движения,  $\frac{1}{2} \sum_r \sigma_r$  в единицах  $\hbar$ . Согласно (39) § 36 мы имеем :

$$s(s+1) = \left( \frac{1}{2} \sum_r \sigma_r, \frac{1}{2} \sum_t \sigma_t \right).$$

Используя эту формулу, мы получим

$$2 \sum_{r < t} (\sigma_r, \sigma_t) = \left( \sum_r \sigma_r, \sum_t \sigma_t \right) - \sum_r (\sigma_r, \sigma_r) = 4s(s+1) - 3n.$$

Следовательно,

$$\chi_{12} = -\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{4s(s+1) - 3n}{n(n-1)} \right\} = -\frac{n(n-4) + 4s(s+1)}{2n(n-1)}. \quad (30)$$

Итак,  $\chi_{12}$  может быть выражено, как функция от динамической переменной  $s$  и числа электронов  $n$ . Всякое другое  $\chi$  может быть вычислено сходным путем и будет функцией только от  $s$  и от  $n$ , так как нет других симметричных функций всех динамических переменных  $\sigma$ , которые могли бы войти в  $\chi$ . Поэтому имеется по одному набору численных значений  $\chi'$  величины  $\chi$  и, следовательно, одному обособленному набору состояний для каждого собственного значения  $s'$  величины  $s$ . Собственные значения  $s$  равны

$$\frac{1}{2}n, \frac{1}{2}n-1, \frac{1}{2}n-2, \dots$$

Ряд обрывается на значении 0 или  $\frac{1}{2}$ .

Мы видим, таким образом, что каждое из стационарных состояний многоэлектронной системы является собственным состоянием  $s$  величины полного спинового момента количества движения  $\frac{1}{2} \sum_r \sigma_r$  в единицах  $\hbar$ . Это состояние

соответствует определенному собственному значению  $s'$ . Для любого заданного  $s'$  будет  $2s' + 1$  возможных значений проекции вектора полного спина на некоторое направление, и они будут соответствовать  $2s' + 1$  независимым стационарным состояниям с одной и той же энергией. Если не пренебрегать силами, возникающими из-за спинового магнитного момента, эти  $2s' + 1$  состояний, вообще говоря, расщепятся на  $2s' + 1$  состояний со слегка различными энергиями, и будут образовывать мультиплет с мультиплетностью  $2s' + 1$ . Переходы с изменением  $s'$ , т. е. переходы от одной мультиплетности к другой, не могут происходить, если пренебрегать спиновыми силами; они происходят лишь с малой вероятностью, если спиновыми силами не пренебрегать.

Мы можем определить уровни энергии многоэлектронной системы в первом приближении, применяя теорию предыдущего параграфа, в которой векторы  $|\alpha'\rangle$  относятся только к орбитальным переменным, и пользуясь формулой (23). Если рассматривать только кулоновские силы между электронами, то энергия взаимодействия  $V$  будет представлять собой сумму слагаемых, каждое из которых относится только к двум электронам. Это приводит к равенству нулю всех матричных элементов  $V_{rs}$ , за исключением тех, для которых  $P^x$  есть тождественная перестановка или простая транспозиция двух электронов. Поэтому формула (23) сводится к соотношению

$$V \approx V_1 + \sum_{r < s} V_{rs} P_{rs}^{\alpha}, \quad (31)$$

где  $V_{rs}$  есть матричный элемент, относящийся к транспозиции электронов  $r$  и  $s$ . Так как величины  $P^{\alpha}$  имеют те же свойства, что и величины  $P^x$ , то любая функция от  $P^{\alpha}$  будет иметь те же самые собственные значения, что и соответствующая функция от  $P^x$ , так что правая часть (31) будет иметь те же значения, что и

$$V_1 + \sum_{r < s} V_{rs} P_{rs}^x$$

или, учитывая (29),

$$V_1 - \frac{1}{2} \sum_{r < s} V_{rs} \{1 + (\sigma_r, \sigma_s)\}. \quad (32)$$

Собственные значения (32) будут давать поправки к уровням энергии в первом приближении. Вид выражения (32) дает основание считать приемлемой модель, в которой предполагается взаимодействие между спинами различных электронов с энергией  $-\frac{1}{2} V_{rs}(\sigma_r, \sigma_s)$ , где  $r$  и  $s$  — орбитальные состояния. Эта энергия взаимодействия гораздо больше, чем энергия взаимодействия спиновых магнитных моментов. Такие модели атома употреблялись еще до того, как было получено их квантовомеханическое обоснование.

Возможен случай совпадения двух орбитальных состояний невозмущенной системы, другими словами, векторы  $|\alpha^r\rangle$ , содержащие орбитальные переменные, могут быть одинаковы для двух электронов. Допустим, что векторы  $|\alpha^1\rangle$  и  $|\alpha^2\rangle$  одинаковы. Тогда следует брать только те собственные значения (31), которые согласуются с равенством  $P_{12}^\alpha = 1$ , или такие собственные значения (32), которые согласуются с равенством  $P_{12}^x = 1$  или  $P_{12}^\sigma = -1$ . Согласно формуле (28) это условие дает  $(\sigma_1, \sigma_2) = -3$ , так что  $(\sigma_1 + \sigma_2)^2 = 0$ . Следовательно, сумма двух спинов  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  равна нулю, что можно толковать как антипараллельность спинов  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ . Таким образом, можно сказать, что два электрона, находящиеся в одном и том же орбитальном состоянии, имеют антипараллельные спины. Больше двух электронов в одном и том же орбитальном состоянии находиться не может,



## ГЛАВА X

### ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

#### § 59. Ансамбль бозонов

Рассмотрим динамическую систему, состоящую из  $u'$  одинаковых частиц. Введем представление для одной частицы в виде дискретных базисных векторов  $|\alpha^{(1)}\rangle, |\alpha^{(2)}\rangle, |\alpha^{(3)}\rangle, \dots$ . Тогда, как было разъяснено в § 54, мы получим симметричное представление для ансамбля из  $u'$  частиц, если возьмем в качестве базисного вектора произведение

$$|\alpha_1^a\rangle |\alpha_2^b\rangle |\alpha_3^c\rangle \dots |\alpha_{u'}^g\rangle = |\alpha_1^a \alpha_2^b \alpha_3^c \dots \alpha_{u'}^g\rangle, \quad (1)$$

в котором каждой частице соответствует один множитель. Нижние значки 1, 2, 3, ...,  $u'$  у величин  $\alpha$  нумеруют частицы, а индексы  $a, b, c, \dots, g$  соответствуют верхним значкам  $^{(1)}, ^{(2)}, ^{(3)}$ , в базисных векторах для одной частицы. Если частицы являются бозонами, так что имеются только симметричные состояния, то нужно иметь дело только с симметричными векторами, которые могут быть построены из выражений вида (1). Состояния, соответствующие этим симметричным векторам, образуют полную систему состояний для собрания бозонов. Мы можем построить теорию такого ансамбля бозонов следующим образом.

Введем линейный оператор  $S$ , определив его выражением

$$S = u'!^{-\frac{1}{2}} \sum P, \quad (2)$$

где сумма берется по всем  $u'!$  перестановкам  $u'$  частиц. Действие  $S$  на любой вектор системы дает симметричный вектор. Поэтому мы можем назвать  $S$  *симметризирующим оператором*. Согласно (8) § 55 он является вещественным. Действуя им на вектор (1), получим

$$u'!^{-\frac{1}{2}} \sum P |\alpha_1^a \alpha_2^b \alpha_3^c \dots \alpha_{u'}^g\rangle = S |\alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g\rangle, \quad (3)$$

причем номера частиц в правой части опущены, так как они становятся несущественными. Вектор (3) соответствует состоянию ансамбля из  $u'$  бозонов с определенным распределением бозонов по различным бозонным состояниям, причем какое-либо определенное состояние какому-либо определенному бозону не приписывается. Распределение бозонов задано, если установлено, сколько бозонов имеется в каждом бозонном состоянии. Пусть в таком распределении  $n'_1, n'_2, n'_3, \dots$  будут числа бозонов в состояниях  $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \alpha^{(3)}, \dots$  соответственно. Числа  $n'$  определяются алгебраически с помощью уравнения

$$\alpha^a + \alpha^b + \alpha^c + \dots + \alpha^g = n'_1 \alpha^{(1)} + n'_2 \alpha^{(2)} + n'_3 \alpha^{(3)} + \dots \quad (4)$$

Сумма величин  $n'$ , очевидно, равна  $u'$ . Число величин  $n'$  равно числу базисных векторов  $|\alpha^{(r)}\rangle$ , которое в большинстве приложений теории много больше чем  $u'$ , так что большая часть чисел  $n'$  будет равна нулю. Если величины  $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c, \dots, \alpha^g$  все различны, т. е. если числа  $n'$  все равны 0 или 1, то вектор (3) нормирован, так как в этом случае члены в левой части (3) взаимно ортогональны, и каждый вносит вклад  $u'^{-1}$  в квадрат длины вектора. Однако если  $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c, \dots, \alpha^g$  не все различны, то в левой части (3) будут равны друг другу члены, возникающие от тех перестановок  $P$ , которые только обменивают бозоны в одинаковых состояниях. Число равных членов будет  $n'_1! n'_2! n'_3! \dots$ , так что квадрат длины вектора (3) будет

$$\langle \alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g | S^2 | \alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g \rangle = n'_1! n'_2! n'_3! \dots \quad (5)$$

Для рассмотрения общего состояния ансамбля бозонов можно ввести числа  $n_1, n_2, n_3, \dots$  бозонов в состояниях  $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \alpha^{(3)}, \dots$  соответственно и считать эти числа динамическими переменными или наблюдаемыми. Они имеют собственные значения 0, 1, 2, ...,  $u'$ . Вектор (3) является общим собственным вектором всех  $n$ , причем он соответствует собственным значениям  $n'_1, n'_2, n'_3, \dots$ . Различные векторы (3) образуют полную систему векторов для динамической системы из  $u'$  бозонов, так что все  $n$  коммутируют (см. теорему, обратную теореме § 13). Далее, имеется только один независимый вектор (3), принадлежащий данному набору собственных значений  $n'_1, n'_2, n'_3, \dots$ . Следовательно, величины  $n$  образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых. Если пронормировать векторы (3) и обозначить полученные

векторы посредством собственных значений  $n$ , которым они соответствуют, т. е. если положить

$$(n'_1! n'_2! n'_3! \dots)^{-\frac{1}{2}} S |\alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g\rangle = |n'_1 n'_2 n'_3 \dots\rangle, \quad (6)$$

то получим систему векторов  $|n'_1 n'_2 n'_3 \dots\rangle$ , где числа  $n$  принимают все неотрицательные целые значения до  $u'$ , причём эти векторы образуют систему базисных векторов представления, в котором все  $n$  диагональны.

Величины  $n$  могут быть выражены как функции наблюдаемых  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_{u'}$ , определяющих базисные векторы индивидуальных бозонов, с помощью уравнений

$$n_\alpha = \sum_r \delta_{\alpha, \alpha_r^0} \quad (7)$$

или уравнений

$$\sum_a n_a f(\alpha^a) = \sum_r f(\alpha_r), \quad (8)$$

справедливых для любой функции  $f$ .

Допустим теперь, что число бозонов в системе не фиксировано, а может меняться. Это число является тогда динамической переменной или наблюдаемой  $u$ , собственные значения которой равны 0, 1, 2, ..., и вектор (3) есть собственный вектор  $u$ , соответствующий собственному значению  $u'$ . Для того чтобы получить полную систему векторов нашей динамической системы, мы должны взять все симметричные векторы (3) для всех значений  $u'$ . Мы можем расположить их в таком порядке:

$$| \rangle, |\alpha^a\rangle, S|\alpha^a \alpha^b\rangle, S|\alpha^a \alpha^b \alpha^c\rangle, \dots \quad (9)$$

Здесь первым выписан вектор без значков, соответствующий состоянию без бозонов, далее идут векторы, соответствующие состояниям с одним бозоном, с двумя бозонами и т. д. Общий вид состояния соответствует вектору, являющемуся суммой различных векторов (9). Векторы (9) все ортогональны друг к другу; в самом деле, два вектора, относящиеся к одному и тому же числу бозонов, ортогональны, как объяснено выше, а два вектора, относящиеся к разным числам бозонов, ортогональны потому, что они являются собственными векторами  $u$ , относящимися к разным собственным значениям. Нормируя все векторы (9), мы получаем систему векторов, аналогичных (6), но без ограничений

для  $n'$  (т. е. каждое  $n'$  принимает все отрицательные целочисленные значения) и эти векторы являются базисными векторами представления, в котором величины  $n$  диагональны для динамической системы, состоящей из переменного числа бозонов.

Если между бозонами нет взаимодействия и если базисные векторы  $|\alpha^{(1)}\rangle, |\alpha^{(2)}\rangle, \dots$  соответствуют стационарным состояниям бозона, то векторы (9) будут соответствовать стационарным состояниям ансамбля бозонов. Число бозонов  $u$  теперь постоянно во времени, но не должно обязательно быть фиксированным числом, т. е. в общем случае состояние является суперпозицией состояний с различными значениями  $u$ . Если энергия одного бозона равна  $H(\alpha)$ , то энергия собрания бозонов будет равна

$$\sum_r H(\alpha_r) = \sum_a n_a H^a, \quad (10)$$

как вытекает из (8), причем  $H^a$  написано для краткости вместо величины  $H(\alpha^a)$ . Это равенство выражает оператор Гамильтона для ансамбля бозонов как функцию от динамических переменных  $n$ .

## § 60. Связь между бозонами и осцилляторами

В § 34 мы изучали гармонический осциллятор, динамическую систему с одной степенью свободы, описываемую каноническими переменными  $q$  и  $p$  и такую, что ее оператор Гамильтона представляет собой сумму квадратов  $q$  и  $p$  с численными коэффициентами. Мы определим математически осциллятор общего характера как систему с одной степенью свободы, описываемую каноническими переменными  $q$  и  $p$ , если ее оператор Гамильтона есть степенной ряд по  $q$  и  $p$ , и остается таковым, когда система возмущена каким-либо образом \*). Будем изучать динамическую систему, состоящую из нескольких таких осцилляторов. Можно вместо  $q$  и  $p$  использовать для описания осцилляторов комплексную динамическую переменную  $\eta$ , аналогичную величине  $\eta$  в § 34, вместе с сопряженной величиной  $\bar{\eta}$ , причём

---

\*) Заметим, во избежание недоразумений, что для осциллятора общего характера, о котором говорит автор, вектор (14) не является собственным вектором оператора энергии, в отличие от гармонического осциллятора, (Прим. перев.)

$\eta$  и  $\bar{\eta}$  удовлетворяют перестановочным соотношениям (7) § 34. Припишем различным осцилляторам номера 1, 2, 3, ... Вся система осцилляторов будет описываться динамическими переменными  $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots, \bar{\eta}_1, \bar{\eta}_2, \bar{\eta}_3, \dots$ , удовлетворяющими перестановочным соотношениям

$$\left. \begin{aligned} \eta_a \eta_b - \eta_b \eta_a &= 0, \\ \eta_a \bar{\eta}_b - \bar{\eta}_b \eta_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a \eta_b - \eta_b \bar{\eta}_a &= \delta_{ab}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Положим

$$\eta_a \bar{\eta}_a = n_a, \quad (12)$$

так что будет

$$\bar{\eta}_a \eta_a = n_a + 1. \quad (13)$$

Величины  $n$  являются наблюдаемыми, коммутирующими друг с другом, и рассмотрение § 34 показывает, что каждая из них имеет в качестве собственных значений неотрицательные целые числа. Для осциллятора  $a$  имеется в фоксовском представлении стандартный кет, скажем  $|0_a\rangle$ , который является нормированным собственным вектором  $n_a$ , принадлежащим собственному значению, равному нулю. Перемножая все эти стандартные векторы, мы получаем стандартный кет системы осцилляторов в фоксовском представлении

$$|0_1\rangle |0_2\rangle |0_3\rangle \dots \quad (14)$$

Он является общим собственным вектором всех  $n$ , соответствующих нулевым собственным значениям. Мы обозначим его просто через  $|0\rangle$ . Из (13) § 44 следует

$$\bar{\eta}_a |0\rangle = 0 \quad (15)$$

для любого  $a$ .

Рассмотрение § 34 также показывает, что если  $n'_1, n'_2, n'_3, \dots$  — любые неотрицательные целые числа, то

$$\eta_1^{n'_1} \eta_2^{n'_2} \eta_3^{n'_3} \dots |0\rangle \quad (16)$$

является общим собственным кетом всех  $n$ , соответствующих собственным значениям  $n'_1, n'_2, n'_3, \dots$ . Различные векторы (16), получаемые при различных  $n'$ , образуют полную систему векторов, которые все ортогональны друг к другу, и квадрат длины одного из них, согласно (16) § 34, равен

$$n'_1! n'_2! n'_3! \dots$$

Если иметь в виду результат (5), то отсюда видно, что кет-векторы (16) имеют в точности те же самые свойства, что и кеты (9), так что мы можем, не приходя к противоречию, приравнять каждый вектор (16) кету (9), относящемуся к тем же самым  $n'$ . Для этого нужно положить

$$S|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\dots\alpha^g\rangle = \eta_a\eta_b\eta_c\dots\eta_g|0\rangle. \quad (17)$$

Стандартный кет  $|0\rangle$  становится равным первому из векторов (9), соответствующему отсутствию бозонов.

Уравнение (17) означает, что состояния ансамбля бозонов отождествляются с состояниями набора осцилляторов. Это значит, что *динамическая система, состоящая из ансамбля одинаковых бозонов, эквивалентна динамической системе, состоящей из ансамбля осцилляторов — эти две системы представляют собой одну и ту же систему, рассматриваемую с двух разных точек зрения*. С каждым независимым бозонным состоянием связан один осциллятор. Мы имеем один из наиболее фундаментальных результатов квантовой механики, позволяющий объединить волновую и корпускулярную теории света.

Рассмотрение в предыдущем параграфе было основано на дискретном ряде базисных кетов  $|\alpha^a\rangle$  для бозона. Мы могли бы перейти к другому дискретному ряду базисных векторов, скажем,  $|\beta^A\rangle$  и построить аналогичную теорию, основываясь уже на них. Базисные векторы собрания бозонов будут вместо (9)

$$| \rangle, |\beta^A\rangle, S|\beta^A\beta^B\rangle, S|\beta^A\beta^B\beta^C\rangle, \dots \quad (18)$$

Первый кет в (18), относящийся к состоянию без бозонов, тот же самый, что и в (9). Векторы (18), относящиеся к состоянию с одним бозоном, линейно выражаются через те из векторов (9), которые относятся к состоянию с одним бозоном, именно

$$|\beta^A\rangle = \sum_a |\alpha^a\rangle \langle \alpha^a | \beta^A \rangle, \quad (19)$$

и вообще векторы (18), соответствующие наличию  $u'$  бозонов, линейно выражаются через кеты (9), соответствующие наличию того же числа  $u'$  бозонов. С новыми базисными состояниями  $|\beta^A\rangle$  для бозонов будет связан новый ряд осцилляторных переменных, и аналогично (17) мы будем иметь

$$S|\beta^A\beta^B\beta^C\dots\rangle = \eta_A\eta_B\eta_C\dots|0\rangle. \quad (20)$$

Таким образом, вектор  $\eta_A \eta_B \dots |0\rangle$  с числом множителей  $\eta_A, \eta_B, \dots$ , равным  $u'$ , должен быть линейной функцией от векторов  $\eta_a \eta_b \dots |0\rangle$  с тем же числом множителей  $\eta_a, \eta_b \dots$ . Отсюда следует, что каждый линейный оператор  $\eta_A$  должен быть линейной функцией от  $\eta_a$ . Уравнение (19) дает

$$\eta_A |0\rangle = \sum_a \eta_a |0\rangle \langle \alpha^a | \beta^A \rangle$$

и, следовательно,

$$\eta_A = \sum_a \eta_a \langle \alpha^a | \beta^A \rangle. \quad (21)$$

Итак, операторы  $\eta$  преобразуются по тому же самому закону, что и базисные кеты бозона. Преобразованные операторы  $\eta$  вместе с сопряженными операторами удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям (11), что и исходные. Преобразованные  $\eta$  равноправны с исходными и, следовательно, если мы рассматриваем нашу динамическую систему как набор осцилляторов, то различные степени свободы не имеют инвариантного значения.

Величины  $\eta$  преобразуются по тому же самому закону, что и базисные бра-векторы и, следовательно, по тому же закону, что и числа  $\langle \alpha^a | x \rangle$ , образующие представление состояния  $x$ . Имея в виду эту аналогию, часто говорят, что  $\eta_a$  получается в результате *вторичного квантования*, примененного к  $\langle \alpha^a | x \rangle$ ; под этим подразумевается, что, построив квантовую теорию одной частицы и введя числа  $\langle \alpha^a | x \rangle$ , представляющие состояние частицы, можно эти числа превратить в линейные операторы, которые вместе со своими сопряженными удовлетворяют правильным перестановочным соотношениям типа (11), что дает подходящую математическую основу для рассмотрения системы частиц, если они являются бозонами. Аналогичная процедура существует для фермионов и будет изложена в § 65.

Так как ансамбль бозонов представляет собой то же самое, что набор осцилляторов, то можно выразить любую симметричную функцию бозонов через осцилляторные переменные  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ . Примером этого является уравнение (10), где  $n_a$  следует заменить на  $\eta_a \bar{\eta}_a$ . Посмотрим, как обстоит дело в общем случае. Возьмем сперва случай, когда функция от бозонных переменных имеет вид

$$U_T = \sum_r U_r, \quad (22)$$

где каждая  $U_r$  есть функция только динамической переменной  $r$ -го бозона, так что она имеет представитель  $\langle \alpha_r^a | U_r | \alpha_r^b \rangle$ , отнесенный к базисному вектору  $|\alpha_r^b\rangle$   $r$ -го бозона. Для того чтобы величина  $U_T$  была симметричной, этот представитель должен быть одним и тем же для всех  $r$ , так что он может зависеть только от обоих собственных значений, обозначенных через  $a$  и  $b$ . Мы можем поэтому записать его в виде

$$\langle \alpha_r^a | U_r | \alpha_r^b \rangle = \langle \alpha^a | U | \alpha^b \rangle = \langle a | U | b \rangle, \quad (23)$$

где для краткости написано просто  $a$  и  $b$  вместо  $\alpha^a$  и  $\alpha^b$ . Мы имеем

$$U_r | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \rangle = \sum_a | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \alpha_r^a \dots \rangle \langle a | U | x_r \rangle. \quad (24)$$

Суммируя по всем  $r$  и действуя на обе части равенства симметризирующим оператором  $S$ , получаем

$$S U_T | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \rangle = \sum_r \sum_a S | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \alpha_r^a \dots \rangle \langle a | U | x_r \rangle. \quad (25)$$

Так как  $U_T$  симметрично, мы можем заменить  $S U_T$  на  $U_T S$ , и мы можем поэтому подставить для симметричных векторов в (25) их значения (17). Таким путем получим

$$\begin{aligned} U_T \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle &= \sum_a \sum_r \eta_a \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \langle a | U | x_r \rangle = \\ &= \sum_{ab} \eta_a \sum_r \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \delta_{bx_r} \langle a | U | b \rangle, \end{aligned} \quad (26)$$

где символ  $\eta_{x_r}^{-1}$  означает, что нужно исключить множитель  $\eta_{x_r}$ . Из уравнения (15) и из перестановочных соотношений (11) имеем

$$\bar{\eta}_b \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle = \sum_r \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \delta_{bx_r}. \quad (27)$$

Заметим, что переменная  $\bar{\eta}_b$  аналогична оператору частной производной  $\partial/\partial\eta_b$ , так что формула (26) принимает вид

$$U_T \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle = \sum_{ab} \eta_a \bar{\eta}_b \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \langle a | U | b \rangle. \quad (28)$$

Векторы  $\eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle$  образуют полную систему, и, следовательно, мы можем вывести из (28) операторное уравнение

$$U_T = \sum_{ab} \eta_a \langle a | U | b \rangle \bar{\eta}_b. \quad (29)$$



Оно выражает  $U_T$  через переменные  $\eta$  и  $\bar{\eta}$  и матричные элементы  $\langle a | U | b \rangle$ .

Теперь возьмем симметричную функцию бозонных переменных, состоящую из суммы членов, каждый из которых относится к двум бозонам,

$$V_T = \sum_{r, s \neq r} V_{rs}. \quad (30)$$

Нет необходимости предполагать, что  $V_{rs} = V_{sr}$ . Соответственно в формуле (23) величина  $V_{rs}$  имеет матричные элементы

$$\langle \alpha_r^a \alpha_s^b | V_{rs} | \alpha_r^c \alpha_s^d \rangle = \langle ab | V | cd \rangle. \quad (31)$$

Аналогично предыдущему мы получаем равенство, соответствующее (25),

$$\begin{aligned} SV_T | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \rangle = \\ = \sum_{r, s \neq r} \sum_{ab} S | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \dots \alpha_r^a \dots \alpha_s^b \dots \rangle \langle ab | V | x_r x_s \rangle \end{aligned} \quad (32)$$

и равенство, соответствующее (26),

$$\begin{aligned} V_T \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle = \\ = \sum_{abcd} \eta_a \eta_b \sum_{r, s \neq r} \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_s}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \delta_{cx_r} \delta_{dx_s} \langle ab | V | cd \rangle. \end{aligned} \quad (33)$$

Обобщая (27), можно вывести соотношение

$$\bar{\eta}_c \bar{\eta}_d \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle = \sum_{r, s \neq r} \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_s}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \delta_{cx_r} \delta_{dx_s}, \quad (34)$$

так что равенство (33) принимает вид

$$V_T \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle = \sum_{abcd} \eta_a \eta_b \bar{\eta}_c \bar{\eta}_d \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots | 0 \rangle \langle ab | V | cd \rangle.$$

Это дает операторное уравнение

$$V_T = \sum_{abcd} \eta_a \eta_b \langle ab | V | cd \rangle \bar{\eta}_c \bar{\eta}_d. \quad (35)$$

Развивая этот метод, можно получить выражение через  $\eta$  и  $\bar{\eta}$  для произвольной симметричной функции от бозонных переменных.

Предыдущая теория может быть легко обобщена на случай, когда ансамбль бозонов взаимодействует с другой динамической системой, которую мы для определенности назовем

атомом. Нужно ввести базисные векторы, скажем  $|\xi'\rangle$ , для атома, взятого в отдельности. После этого можно получить базисные векторы всей системы из атома и бозонов, умножая вектор  $|\xi'\rangle$  на каждый из векторов (9). Можно записать эти векторы в виде

$$|\xi'\rangle, |\xi'\alpha^a\rangle, S|\xi'\alpha^a\alpha^b\rangle, S|\xi'\alpha^a\alpha^b\alpha^c\rangle, \dots \quad (36)$$

Систему можно рассматривать как состоящую из атома, взаимодействующего с набором осцилляторов, так что ее можно описывать атомными переменными и осцилляторными переменными  $\eta_a, \bar{\eta}_a$ . Используя опять стандартный вектор  $|0\rangle$  для набора осцилляторов, мы имеем уравнение

$$S|\xi'\alpha^a\alpha^b\alpha^c\dots\rangle = \eta_a\eta_b\eta_c\dots|0\rangle|\xi'\rangle, \quad (37)$$

соответствующее (17) и выражающее базисные векторы (36) через осцилляторные переменные.

Любая функция от атомных переменных и бозонных переменных, симметричная по всем бозонам, может быть выражена как функция от атомных переменных и от переменных  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ . Рассмотрим сперва функцию  $U_T$  вида (22), где  $U_r$  есть функция только от атомных переменных и переменных  $r$ -го бозона, так что она имеет представитель  $\langle\xi'\alpha_r^a|U_r|\xi''\alpha_r^b\rangle$ . Чтобы функция  $U_T$  могла быть симметричной по всем бозонам, этот представитель не должен зависеть от  $r$ , так что мы можем записать его в виде  $\langle\xi'\alpha^a|U|\xi''\alpha^b\rangle$ . Определим теперь  $\langle a|U|b\rangle$  как такую функцию атомных переменных, представитель которой есть  $\langle\xi'\alpha^a|U|\xi''\alpha^b\rangle$ , так что мы имеем

$$\langle\xi'\alpha_r^a|U_r|\xi''\alpha_r^b\rangle = \langle\xi'\alpha^a|U|\xi''\alpha^b\rangle = \langle\xi'|\langle a|U|b\rangle|\xi''\rangle, \quad (38)$$

что соответствует формуле (23). Можно перенести на рассматриваемый случай уравнения (24)–(28), если умножить обе стороны всех этих уравнений на  $|\xi'\rangle$  справа. Тогда получится, что формула (29) остается в силе. Аналогично можно рассмотреть симметричную функцию  $V_T$  вида (30), где  $V_{rs}$  — функция только атомных переменных и переменных  $r$ -го и  $s$ -го бозонов. Определяя  $\langle ab|V|cd\rangle$  как такую функцию атомных переменных, представитель которой есть

$$\langle\xi'\alpha_r^a\alpha_s^b|V_{rs}|\xi''\alpha_r^c\alpha_s^d\rangle,$$

найдем, что по-прежнему справедлива формула (35).

## § 61. Испускание и поглощение бозонов

Предположим, что осцилляторы, рассмотренные в предыдущем параграфе, являются гармоническими, и что между ними нет взаимодействия. Энергия  $a$ -го осциллятора, согласно (5) § 34, равна

$$H_a = \hbar\omega_a \eta_a \bar{\eta}_a + \frac{1}{2} \hbar\omega_a.$$

Мы пренебрежем постоянным членом  $\frac{1}{2} \hbar\omega_a$ , представляющим собой энергию осциллятора в наинизшем состоянии — так называемую «нулевую энергию». Как объяснено в начале § 30, это пренебрежение не оказывает никакого влияния на динамические свойства и сводится лишь к несколько иному определению  $H_a$ . Полная энергия осцилляторов тогда равна, если учесть соотношение (12),

$$H_T = \sum_a H_a = \sum_a \hbar\omega_a \eta_a \bar{\eta}_a = \sum_a \hbar\omega_a n_a. \quad (39)$$

Это выражение имеет тот же вид, что и (10), только теперь вместо  $H^a$  стоит  $\hbar\omega_a$ . Следовательно, набор гармонических осцилляторов эквивалентен ансамблю невзаимодействующих бозонов в стационарных состояниях. Если один из осцилляторов находится в квантовом состоянии  $n'$ , то имеется  $n'$  бозонов в соответствующем бозонном состоянии.

В общем случае оператор Гамильтона для набора осцилляторов будет степенным рядом по переменным  $\eta$ ,  $\bar{\eta}_a$ . Мы будем иметь

$$H_T = H_P + \sum_a (U_a \eta_a + \bar{U}_a \bar{\eta}_a) + \\ + \sum_{ab} (U_{ab} \eta_a \bar{\eta}_b + V_{ab} \eta_a \eta_b + \bar{V}_{ab} \bar{\eta}_a \bar{\eta}_b) + \dots, \quad (40)$$

где  $H_P$ ,  $U_a$ ,  $U_{ab}$ ,  $V_{ab}$  являются числами,  $H_P$  вещественно и  $U_{ab} = \bar{U}_{ba}$ . Если осцилляторы взаимодействуют с атомами (см. конец предыдущего параграфа), то полный оператор Гамильтона будет иметь вид (40), но  $H_P$ ,  $U_a$ ,  $U_{ab}$ ,  $V_{ab}$  будут функциями от атомных переменных, и, в частности,  $H_P$  будет оператором Гамильтона для самого атома. Рассмотрение этой динамической системы в общем виде является довольно сложным. В практических применениях обычно

предполагается, что члены

$$H_P + \sum_a U_{aa} \eta_a \bar{\eta}_a \quad (41)$$

велики по сравнению с другими и описывают невозмущенную систему. Остальные члены рассматриваются, согласно теории § 44, как возмущение, вызывающее переходы в невозмущенной системе. Если, далее, величина  $U_{aa}$  не зависит от атомных переменных, то невозмущенная система с оператором Гамильтона (41) состоит просто из атома с оператором Гамильтона  $H_P$  и из ансамбля невзаимодействующих бозонов в стационарных состояниях, которым соответствует оператор Гамильтона (39).

Рассмотрим, какие переходы вызываются различными членами, представляющими в формуле (40) возмущение. Выберем стационарное состояние невозмущенной системы, при котором атом находится в стационарном состоянии  $\xi'$ , и бозоны — в стационарных бозонных состояниях  $a, b, c, \dots$ . Этому стационарному состоянию невозмущенной системы соответствует вектор

$$\eta_a \eta_b \eta_c \dots |0\rangle |\xi'\rangle, \quad (42)$$

аналогичный (37). Если член  $U_x \eta_x$  из (40) умножить на этот вектор, то в результате получится линейная комбинация векторов вида

$$\eta_x \eta_a \eta_b \eta_c \dots |0\rangle |\xi''\rangle, \quad (43)$$

где  $\xi''$  означает некоторое стационарное состояние атома. Вектору (43) соответствует состояние с числом бозонов на единицу большим, чем в векторе (42), причем добавочный бозон находится в состоянии  $x$ . Следовательно, член возмущения  $U_x \eta_x$  вызывает переходы, в которых испускается один бозон в состоянии  $x$ , а атом совершает какой-то скачок. Если член  $U_x \bar{\eta}_x$  из (40) умножить на (42), то в результате получится нуль, за исключением случая, когда (42) содержит множитель  $\eta_x$ ; в этом же случае получается линейная комбинация векторов вида

$$\eta_x^{-1} \eta_a \eta_b \eta_c \dots |0\rangle |\xi''\rangle,$$

которые соответствуют уменьшению на единицу числа бозонов в состоянии  $x$ . Таким образом, член возмущения  $U_x \bar{\eta}_x$  вызывает переходы, в которых поглощается один бозон из состояния  $x$  и атом совершает какой-то скачок. Аналогично

находим, что член возмущения  $U_{xy}\eta_x\bar{\eta}_y$  ( $x \neq y$ ) вызывает процессы, в которых один бозон поглощается из состояния  $y$  и один бозон испускается в состояние  $x$ , или, что то же самое физически, один бозон переходит из состояния  $y$  в состояние  $x$ . Процессы такого рода могут вызываться членами типа  $U_T$  (см. формулы (22) и (29)) в энергии возмущения, если диагональные матричные элементы вида  $\langle a | U | a \rangle$  равны нулю. Члены возмущения вида  $V_{xy}\eta_x\bar{\eta}_y$ ,  $\bar{V}_{xy}\eta_x\bar{\eta}_y$  вызывают процессы, в которых испускаются или поглощаются два бозона и т. д. для более сложных членов. При любом из этих процессов поглощения или испускания атом может совершить скачок из одного состояния в другое.

Определим, как зависит вероятность каждого из этих процессов перехода от числа бозонов, имеющихся первоначально в различных бозонных состояниях. Согласно §§ 44 и 46 вероятность перехода всегда пропорциональна квадрату модуля матричного элемента энергии возмущения, относящегося к рассматриваемым двум состояниям. Таким образом, вероятность испускания бозона в состоянии  $x$  при переходе атома из состояния  $\xi'$  в состояние  $\xi''$  пропорциональна величине

$$|\langle \xi'' | \langle n'_1 n'_2 \dots (n'_x + 1) \dots | U_x \eta_x | n'_1 n'_2 \dots n'_x \dots \rangle | \xi' \rangle|^2, \quad (44)$$

где  $n'$  — числа бозонов, первоначально находившихся в различных состояниях. Но из (6) и (17), принимая во внимание (4), имеем

$$|n'_1 n'_2 n'_3 \dots \rangle = (n'_1! n'_2! n'_3! \dots)^{-1/2} \eta_1^{n'_1} \eta_2^{n'_2} \eta_3^{n'_3} \dots |0\rangle, \quad (45)$$

так что

$$\eta_x |n'_1 n'_2 \dots n'_x \dots \rangle = (n'_x + 1)^{1/2} |n'_1 n'_2 \dots (n'_x + 1) \dots \rangle. \quad (46)$$

Следовательно, выражение (44) равно

$$(n'_x + 1) |\langle \xi'' | U_x | \xi' \rangle|^2, \quad (47)$$

откуда видно, что вероятность перехода, при котором бозон испускается в состояние  $x$ , пропорциональна первоначальному числу бозонов в состоянии  $x$ , увеличенному на единицу.

Вероятность поглощения бозона из состояния  $x$  при переходе атома из состояния  $\xi'$  в состояние  $\xi''$  пропорциональна величине

$$|\xi'' | \langle n'_1 n'_2 \dots (n'_x - 1) \dots | \bar{U}_x \bar{\eta}_x | n'_1 n'_2 \dots n'_x \dots \rangle | \xi' \rangle|^2, \quad (48)$$

где по-прежнему  $n'$  — числа бозонов, первоначально находящихся в различных состояниях. Из (45) имеем

$$\bar{\eta}_x |n'_1 n'_2 \dots n'_x \dots\rangle = n_x'^{1/2} |n'_1 n'_2 \dots (n'_x - 1) \dots\rangle, \quad (49)$$

так что выражение (48) равно

$$n'_x |\langle \xi'' | \bar{U}_x | \xi' \rangle|^2. \quad (50)$$

Следовательно, *вероятность перехода, при котором бозон поглощается из состояния  $x$ , пропорциональна числу бозонов, имевшихся первоначально в состоянии  $x$ .*

Аналогичные методы могут быть применены к более сложным процессам; они показывают, что вероятность процессов, в которых бозон переходит из состояния  $y$  в состояние  $x$  ( $x \neq y$ ), пропорциональна  $n'_y (n'_x + 1)$ . Вообще, вероятность процесса, в котором бозоны поглощаются из состояний  $x, y, \dots$  и испускаются в состояния  $a, b, \dots$ , пропорциональна величине

$$n'_x n'_y \dots (n'_a + 1) (n'_b + 1) \dots, \quad (51)$$

где величины  $n'$  означают каждый раз числа бозонов, имевшихся первоначально. Эти результаты справедливы как для прямых переходов, так и для переходов, идущих через одно или более промежуточных состояний, согласно толкованию, данному в § 44.

## § 62. Применение к фотонам

Поскольку фотоны являются бозонами, то к ним применима вышеизложенная теория. Фотон находится в стационарном состоянии, когда у него есть определенный импульс. Он имеет тогда два независимых состояния поляризации, в качестве которых можно взять два взаимно перпендикулярных состояния линейной поляризации. Динамическими переменными, необходимыми для описания стационарных состояний, будут вектор импульса  $\mathbf{p}$  и поляризационная переменная  $\mathbf{l}$ , представляющая собой единичный вектор, перпендикулярный  $\mathbf{p}$ . Переменные  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{l}$  играют роль переменных  $\alpha$ , введенных ранее. Собственные значения  $\mathbf{p}$  состоят из всех чисел от  $-\infty$  до  $\infty$  для каждой из трех декартовых компонент  $\mathbf{p}$ , тогда как для каждого собственного значения  $\mathbf{p}'$  вектора  $\mathbf{p}$  имеется всегда два собственных значения  $\mathbf{l}$ , именно; два произвольно выбранных вектора, перпен-

дикулярных к  $\mathbf{p}'$  и друг к другу. Поскольку собственные значения  $\mathbf{p}$  образуют сплошной спектр, имеется непрерывная область стационарных состояний, дающих базисные векторы  $|\mathbf{p}'\rangle$ , которые относятся к непрерывной области. Между тем, вышеизложенная теория была построена в предположении дискретных базисных векторов  $|\alpha'\rangle$  для бозонов. Существует два математических приема, которыми можно воспользоваться для преодоления этого несоответствия.

Один из них состоит в замене непрерывного трехмерного распределения собственных значений  $\mathbf{p}$  большим числом дискретных точек, лежащих очень близко друг к другу и образующих «порошок», рассыпанный по всему трехмерному пространству импульсов. Пусть  $s_{\mathbf{p}'}$  будет плотностью порошка (число точек в единице объема) в окрестности некоторой точки  $\mathbf{p}'$ . Величина  $s_{\mathbf{p}'}$  должна быть большой и положительной, но в остальном может быть произвольной функцией от  $\mathbf{p}'$ . Интеграл по пространству импульсов можно заменить суммой по точкам в соответствии с формулой

$$\iiint f(\mathbf{p}') d\mathbf{p}'_x d\mathbf{p}'_y d\mathbf{p}'_z = \sum f(\mathbf{p}') s_{\mathbf{p}'}^{-1}. \quad (52)$$

Эта формула служит основанием для перехода от непрерывных значений  $\mathbf{p}'$  к дискретным и наоборот. Любая задача может быть сперва рассмотрена для дискретных значений  $\mathbf{p}'$ , к которым можно применить теорию §§ 59—61, а затем результат можно преобразовать к случаю непрерывных значений  $\mathbf{p}$ . Произвольная плотность  $s_{\mathbf{p}'}$  не должна входить в окончательный результат.

Другой математический прием состоит в том, чтобы видоизменить уравнения теории §§ 59—61 и сделать их применимыми к случаю сплошного спектра базисных векторов  $|\alpha'\rangle$ , заменяя суммы интегралами и символы  $\delta$  в перестановочных соотношениях (11)  $\delta$ -функциями, поскольку это касается переменных со сплошным спектром собственных значений. Каждый из этих приемов имеет свои достоинства и недостатки. Первый более удобен для физического рассмотрения, второй — для математической разработки. Здесь будут развиты оба эти метода и мы будем пользоваться тем из них, какой окажется удобнее в каждом отдельном случае.

Оператор Гамильтона, описывающий совокупность фотонов, взаимодействующих с атомами, будет иметь вид, соответствующий общему выражению (40); коэффициенты  $H_p$ ,  $U_a$ ,  $U_{ab}$ ,  $V_{ab}$  будут содержать атомные переменные. Этот

оператор Гамильтона может быть записан в виде

$$H_T = H_P + H_Q + H_R, \quad (53)$$

где  $H_P$  — энергия атома в отдельности,  $H_R$  — энергия совокупности фотонов в отдельности

$$H_R = \sum_{\mathbf{p}'1'} n_{\mathbf{p}'1'} \hbar \nu_{\mathbf{p}'} \quad (54)$$

(причем  $\nu_{\mathbf{p}'}$  — частота фотона с импульсом  $\mathbf{p}'$ ), и  $H_Q$  — энергия взаимодействия, которая может быть определена по аналогии с классической теорией, как будет показано в следующем параграфе. К системе в целом можно применить метод возмущений в том виде, как он излагался в предыдущем параграфе;  $H_P$  и  $H_R$  представляют собой энергию (41) невозмущенной системы, а  $H_Q$  есть энергия возмущения, вызывающая переходы, в которых испускаются и поглощаются фотоны, а атом совершает скачок из одного стационарного состояния в другое.

Мы видели в предыдущем параграфе, что вероятность акта поглощения пропорциональна числу бозонов, находившихся первоначально в состоянии, из которого поглощается бозон. Отсюда мы можем заключить, что вероятность поглощения фотона из пучка излучения, падающего на атом, пропорциональна интенсивности пучка. Мы также видели, что вероятность процесса испускания пропорциональна первоначальному числу бозонов в соответствующем состоянии, увеличенному на единицу. Для того чтобы истолковать этот результат, нужно тщательно исследовать соотношения, связанные с заменой непрерывной области фотонных состояний дискретной совокупностью.

Пренебрежем на время поляризационной переменной 1. Пусть  $|\mathbf{p}'D\rangle$  — нормированный вектор, соответствующий дискретному фотонному состоянию  $\mathbf{p}'$ . Тогда из соотношения (22) § 16 следует

$$\sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{p}'D\rangle \langle \mathbf{p}'D| = 1,$$

что в силу (52) приводится к виду

$$\int |\mathbf{p}'D\rangle \langle \mathbf{p}'D| s_{\mathbf{p}'} d^3p' = 1. \quad (55)$$

Для краткости мы пишем  $d^3p'$  вместо  $dp'_x dp'_y dp'_z$ . Но если  $|\mathbf{p}'\rangle$  есть базисный вектор, соответствующий состоянию на



сплошного спектра  $p'$ , то на основании формулы (24) § 16 мы имеем

$$\int |p'\rangle \langle p'| d^3p' = 1,$$

откуда следует при сравнении с (55)

$$|p'\rangle = |p'D\rangle s_p^{1/2}. \quad (56)$$

Связь  $|p'\rangle$  и  $|p'D\rangle$  аналогична связи между базисными векторами при изменении весовой функции представления, как видно из соотношения (38) § 16.

При  $n'_{p'}$  фотонах в каждом дискретном фотонном состоянии гиббсовская плотность  $\rho$  ансамбля фотонов, согласно (68) § 33, равна, с учетом (56),

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{p'} |p'D\rangle n'_{p'} \langle p'D| = \int |p'D\rangle n'_{p'} \langle p'D| s_p d^3p' = \\ &= \int |p'\rangle n'_{p'} \langle p'| d^3p'. \end{aligned} \quad (57)$$

Согласно формуле (73) § 33 число фотонов в единице объема в окрестности некоторой точки  $x'$  будет тогда  $\langle x' | \rho | x' \rangle$ . Учитывая (57) и подставляя значение (54) § 23 для функции преобразования  $\langle x' | p' \rangle$ , получим

$$\langle x' | \rho | x' \rangle = \int \langle x' | p' \rangle n'_{p'} \langle p' | x' \rangle d^3p' = \int h^{-3} n'_{p'} d^3p'. \quad (58)$$

Уравнение (58) выражает число фотонов в единице объема через интеграл по импульсному пространству, так что подынтегральное выражение может быть истолковано как число фотонов на единичный объем фазового пространства. Мы получаем, таким образом, результат, что *число фотонов на единичный объем в фазовом пространстве равно  $h^{-3}$ , умноженному на число фотонов в одном дискретном состоянии*, другими словами, *ячейка объемом  $h^3$  в фазовом пространстве эквивалентна одному дискретному состоянию*. Этот результат является общим и справедлив для любого вида частиц. Если не пренебрегать поляризационной переменной, то результат справедлив для каждого из двух независимых состояний поляризации.

Импульс фотона частоты  $\nu$  равен по величине  $h\nu/c$ , так что элемент объема импульсного пространства есть

$$dp_x dp_y dp_z = h^3 c^{-3} \nu^2 d\nu d\omega,$$

где  $d\omega$  — элемент телесного угла в направлении вектора  $p$ .

Следовательно, распределение фотонов с числом  $n'_p$  на одно дискретное состояние, эквивалентное распределению с числом  $h^{-3} n'_p d^3p d^3x$  фотонов на элементе объема  $d^3x$  и на элементе объема импульсного пространства  $d^3p$ , есть то же самое, что распределение по  $n'_p c^{-3} v^2 dv d\omega d^3x$  фотонов на элемент объема  $d^3x$  и интервал частот  $dv$  при направлении движения фотонов внутри  $d\omega$ . Это соответствует плотности энергии  $n'_p h c^{-3} v^3$  на единицу телесного угла и на единичный интервал частоты, или, иначе говоря, на единичный интервал частоты должна приходиться интенсивность (т. е. энергия, проходящая за единицу времени через единичную площадку), равная

$$I_v = n'_p h v^3 / c^2. \quad (59)$$

Тот вывод, что вероятность испускания фотона пропорциональна  $n'_{p1} + 1$ , где  $n'_{p1}$  — число фотонов, находившихся первоначально в данном дискретном состоянии, может быть теперь истолкован как пропорциональность вероятности величине  $I_{v1} + h v^3 / c^2$ , где  $I_{v1}$  — интенсивность падающего излучения на единичный интервал частоты в окрестности частоты испускаемого фотона, если излучение имеет ту же поляризацию **1**, что и испускаемый фотон. Следовательно, при отсутствии падающего излучения все же существует испускание в определенных размерах; испускание увеличивается или *стимулируется* падающим излучением, имеющим то же направление и ту же самую частоту и поляризацию, что и испускаемое излучение. Настоящая теория излучения дополняет несовершенную теорию § 45, поскольку она дает как вынужденное (стимулированное), так и самопроизвольное (спонтанное) излучение. Отношение, которое дает теория для этих двух типов испускания, именно,  $I_{v1} : \frac{h v^3}{c^2}$  согласуется с тем, какое дается эйнштейновской теорией статистического равновесия, упомянутой в § 45. Вероятность рассеяния фотона из состояния  $p'1'$  в состояние  $p''1''$  пропорциональна произведению  $n_{p'1'}$  ( $n_{p'1'} + 1$ ), где  $n$  — числа фотонов, имевшихся первоначально в соответствующих дискретных состояниях. Можно истолковать этот результат как пропорциональность вероятности величине

$$I_{v'1'} \left( I_{v''1''} + \frac{h v'^3}{c^2} \right). \quad (60)$$

Аналогично для более общего излучательного процесса, в котором испускается и поглощается несколько фотонов, вероятность пропорциональна множителю  $I_{\nu 1}$  для каждого поглощенного фотона и множителю  $I_{\nu 1} + \frac{h\nu^3}{c^2}$  для каждого испущенного фотона. Таким образом, процессы стимулируются падающим излучением, имеющим то же самое направление и ту же частоту и поляризацию, что и испускаемый фотон.

### § 63. Энергия взаимодействия между фотоном и атомом

Определим теперь энергию взаимодействия между атомом и ансамблем фотонов, т. е. величину  $H_Q$  из уравнения (53), на основании аналогии с классическим выражением для энергии взаимодействия между атомом и полем излучения. Для простоты мы предположим, что атом состоит из одного электрона, движущегося в электростатическом поле. Поле излучения может быть описано скалярным и векторным потенциалом. Эти потенциалы до некоторой степени произвольны, и могут быть выбраны так, чтобы скалярный потенциал обратился в нуль. Тогда поле будет описываться одним лишь векторным потенциалом  $A_x, A_y, A_z$  или  $\mathbf{A}$ . Как было объяснено в начале § 41, изменение, называемое полем в операторе Гамильтона, имеет вид

$$H_Q = \frac{1}{2m} \left\{ \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - p^2 \right\} = \frac{e}{mc} (\mathbf{p}, \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (61)$$

Такова классическая энергия взаимодействия. Входящая сюда величина  $\mathbf{A}$  должна быть, строго говоря, значением векторного потенциала в некоторой фиксированной точке атома, например в той точке, где находится ядро. Это будет достаточно хорошим приближением, если мы имеем дело с излучением, длина волны которого велика по сравнению с размерами атома.

Рассмотрим сначала поле излучения классически, и, кроме того, будем пренебрегать его взаимодействием с атомом. Вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  удовлетворяет, согласно максвелловской теории, уравнениям

$$\square \mathbf{A} = 0, \quad \text{div } \mathbf{A} = 0, \quad (62)$$

где символ  $\square$  обозначает для краткости  $\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ . Первое из этих уравнений показывает, что представление  $A$  в виде интеграла Фурье будет иметь вид

$$A = \int \{ A_k e^{-i(kx) + 2\pi i \nu_k t} + \bar{A}_k e^{i(kx) - 2\pi i \nu_k t} \} d^3 k. \quad (63)$$

Каждая компонента Фурье представляет собой волну, распространяющуюся со скоростью света и описываемую вектором  $k$ ; направление этого вектора дает направление распространения волны, а абсолютная величина его  $|k|$  связана с частотой соотношением

$$2\pi \nu_k = c |k|. \quad (64)$$

Вектор  $k$  в точности равен деленному на  $\hbar$  импульсу того фотона, который по квантовой теории сопоставляется волне. Каждой величине  $k$  соответствует амплитуда  $A_k$ , являющаяся, вообще говоря, комплексным вектором. Интеграл в (63) берется по всему трехмерному пространству с координатами  $k_x, k_y, k_z$ . Из второго уравнения (62) имеем

$$(k, A_k) = 0. \quad (65)$$

Отсюда видно, что для каждого  $k$  вектор  $A_k$  перпендикулярен к  $k$ , что означает поперечность волн. Вектор  $A_k$  определяется своими двумя проекциями на два направления, перпендикулярные друг к другу и к вектору  $k$ , причем эти две проекции соответствуют двум независимым состояниям линейной поляризации.

Полная энергия излучения дается объемным интегралом

$$H_R = (8\pi)^{-1} \int (\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2) d^3 x, \quad (66)$$

взятым по всему пространству. Стоящие под интегралом электрическое поле излучения  $\mathcal{E}$  и магнитное  $\mathcal{H}$  определяются выражениями

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad \mathcal{H} = \text{rot } A. \quad (67)$$

Пользуясь обычными формулами векторного анализа и учитывая второе уравнение (62), имеем

$$\begin{aligned} \text{div} [A \times \mathcal{H}] &= (\mathcal{H}, \text{rot } A) - (A, \text{rot } \mathcal{H}) = \\ &= \mathcal{H}^2 - (A, \text{rot rot } A) = \mathcal{H}^2 + (A, \nabla^2 A). \end{aligned}$$

Если не выписывать члена, который может быть преобразован в интеграл по бесконечно удаленной поверхности, то выражение (66) приводится к виду

$$H_R = (8\pi)^{-1} \int \left\{ \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) - (\mathbf{A}, \nabla^2 \mathbf{A}) \right\} d^3x. \quad (68)$$

Подставляя сюда значение  $\mathbf{A}$  из (63), мы можем выразить энергию излучения через амплитуды Фурье  $\mathbf{A}_k$ . Энергия излучения постоянна (поскольку мы сейчас пренебрегаем взаимодействием излучения с атомом), так что мы можем проводить расчет, полагая  $t = 0$ . Это означает, что мы полагаем

$$\mathbf{A} = \int (\mathbf{A}_k + \bar{\mathbf{A}}_{-k}) e^{-i(kx)} d^3k, \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{A} &= - \int k^2 (\mathbf{A}_k + \bar{\mathbf{A}}_{-k}) e^{-i(kx)} d^3k, \\ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} &= ic \int |\mathbf{k}| (\mathbf{A}_k - \bar{\mathbf{A}}_{-k}) e^{-i(kx)} d^3k. \end{aligned} \quad (70)$$

Подставляя эти выражения в (38), получим с помощью (49) § 23

$$\begin{aligned} H_R &= (8\pi)^{-1} \iint \{ k'^2 ([\mathbf{A}_k + \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{k'} + \bar{\mathbf{A}}_{-k'}]) - \\ &- |\mathbf{k}| |\mathbf{k}'| ([\mathbf{A}_k - \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{k'} - \bar{\mathbf{A}}_{-k'}]) \} e^{-i(kx)} e^{-i(k'x)} d^3k d^3k' d^3x = \\ &= \pi^2 \iint \{ k'^2 ([\mathbf{A}_k + \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{k'} + \bar{\mathbf{A}}_{-k'}]) - \\ &- |\mathbf{k}| |\mathbf{k}'| ([\mathbf{A}_k - \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{k'} - \bar{\mathbf{A}}_{-k'}]) \} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') d^3k d^3k'. \end{aligned}$$

Здесь  $\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$  есть произведение трех множителей, каждый из которых соответствует одной компоненте  $\mathbf{k}$ . Отсюда получается

$$\begin{aligned} H_R &= \pi^2 \int k^2 \{ ([\mathbf{A}_k + \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{-k} + \bar{\mathbf{A}}_k]) - \\ &- ([\mathbf{A}_k - \bar{\mathbf{A}}_{-k}], [\mathbf{A}_{-k} - \bar{\mathbf{A}}_k]) \} d^3k = \\ &= 2\pi^2 \int k^2 \{ (\mathbf{A}_k, \bar{\mathbf{A}}_k) + (\mathbf{A}_{-k}, \bar{\mathbf{A}}_{-k}) \} d^3k = \\ &= 4\pi^2 \int k^2 (\mathbf{A}_k, \bar{\mathbf{A}}_k) d^3k. \end{aligned} \quad (71)$$

Мы можем заменить непрерывное распределение значений  $\mathbf{k}$  «порошком» дискретных значений  $\mathbf{k}$  аналогично тому, как мы поступали с  $\mathbf{p}$  в предыдущем параграфе. Интеграл (71)

при этом переходит, согласно формуле (52), в сумму

$$H_R = 4\pi^2 \sum_k k^2 (A_k, \bar{A}_k) s_k^{-1},$$

где  $s_k$  — плотность дискретных значений  $k$ . Мы можем также записать это в виде

$$H_R = 4\pi^2 \sum_{kl} k^2 A_{kl} \bar{A}_{kl} s_k^{-1}, \quad (72)$$

где  $A_{kl}$  — проекция  $A_k$  на направление 1, перпендикулярное к  $k$ . Суммирование по 1 относится к двум направлениям 1, перпендикулярным друг к другу. Таким образом, каждому независимому стационарному состоянию фотона соответствует в (72) один член.

Величины поля  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  в некоторой точке  $x$  можно рассматривать как динамические переменные. Величины

$$A_{klt} = A_{kl} e^{2\pi i \nu_k t}, \quad \bar{A}_{klt} = \bar{A}_{kl} e^{-2\pi i \nu_k t}$$

будут тогда динамическими переменными в момент времени  $t$ , так как они связаны с  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  в различных точках пространства  $x$  в момент времени  $t$  уравнениями, не содержащими время (это вытекает из (63) и (67)). Величина  $A_{kl}$  постоянна, так что  $A_{klt}$  изменяется со временем по простому гармоническому закону. Следовательно, величина  $A_{klt}$  аналогична переменной  $\eta_i$  для гармонического осциллятора, определяемой уравнением (3) § 34, причем  $\omega$  для осциллятора соответствует величине  $2\pi \nu_k$ . Мы можем считать каждую величину  $A_{klt}$  пропорциональной величине  $\eta_i$  для некоторого гармонического осциллятора, и тогда поле излучения станет совокупностью осцилляторов.

Перейдем теперь к квантовой теории и будем считать величины  $A_{klt}$  и  $\bar{A}_{klt}$  динамическими переменными в гейзенберговской картине. Выражение (72) для энергии может быть составлено без изменения, поскольку порядок, в котором стоят сомножители  $A_{kl}$  и  $\bar{A}_{kl}$ , обеспечивает отсутствие нулевой энергии. Величина  $A_{klt}$  по-прежнему будет меняться со временем по закону  $e^{i\omega t}$  и по-прежнему может считаться пропорциональной величине  $\eta_i$  для гармонического осциллятора. Множитель пропорциональности может быть определен путем приравнивания выражений (72) и (39) для энергии; при этом значок  $a$  в формуле (39) заменяется двумя переменными  $k$  и 1, а величина  $\hbar \omega_a$  заменяется на  $\hbar \nu_k$ .

В результате получаем

$$4\pi^2 \sum_{kl} k^2 A_{kl} \bar{A}_{kl} s_k^{-1} = \sum_{kl} \hbar v_k \eta_{kl} \bar{\eta}_{kl}.$$

Индекс  $t$  введен для того, чтобы показать, что мы имеем дело с гейзенберговскими динамическими переменными (это требуется при переходе от уравнений классической теории к уравнениям квантовой теории). Отсюда, используя (64) и пренебрегая несущественным произвольным фазовым множителем, получим

$$4\pi^2 A_{kl} = c \hbar^{\frac{1}{2}} v_k^{-\frac{1}{2}} \eta_{kl} s_k^{\frac{1}{2}}. \quad (73)$$

Так вводятся гейзенберговские динамические переменные  $\eta_{kl}$ , которые описывают поле излучения как совокупность осцилляторов. Перестановочные соотношения между  $\eta_{kl}$  и  $\bar{\eta}_{kl}$  известны и даются выражением (11), так что из уравнения (73) определяются перестановочные соотношения между  $A_{kl}$  и  $\bar{A}_{kl}$ . Тем самым оказываются определенными перестановочные соотношения между потенциалами  $A$  и переменными поля  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  в различных точках  $x$  в момент времени  $t$ . (Заметим кстати, что поскольку заданы перестановочные соотношения между  $A_{kl}$  и  $\bar{A}_{kl}$ , то тем самым заданы и перестановочные соотношения для двух потенциалов или величин поля в два различных момента времени.)

Мы можем использовать соотношение (73) и тогда, когда принимается во внимание взаимодействие между полем излучения и атомом. Это означает предположение, что взаимодействие не изменяет перестановочных соотношений между потенциалами и величинами поля в данный момент времени. Но вследствие взаимодействия переменные  $\eta_{kl}$  перестают меняться по простому гармоническому закону и осцилляторы перестают быть гармоническими. Следовательно, взаимодействие может изменить перестановочные соотношения между двумя потенциалами или величинами поля в два различных момента времени.

Мы можем теперь перенести выражение для энергии взаимодействия (61) в квантовую теорию, при этом мы будем писать  $p_i$  вместо  $p$ , чтобы указать, что это гейзенберговская динамическая переменная. Считая, что ядро атома находится в начале координат, положим в (63)  $x = 0$  и подставим результат в (61). Если мы, кроме того, произведем переход

от непрерывных значений  $\mathbf{k}$  к дискретным, то мы получим

$$\begin{aligned} H_{Qt} &= \frac{e}{mc} \int (\mathbf{p}_t, [\mathbf{A}_{\mathbf{k}t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t}]) d^3k + \\ &+ \frac{e^2}{2mc^2} \iint ([\mathbf{A}_{\mathbf{k}t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t}], [\mathbf{A}_{\mathbf{k}'t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'t}]) d^3k d^3k' = \\ &= \frac{e}{mc} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{p}_t, [\mathbf{A}_{\mathbf{k}t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t}]) s_{\mathbf{k}}^{-1} + \\ &+ \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} ([\mathbf{A}_{\mathbf{k}t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t}], [\mathbf{A}_{\mathbf{k}'t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'t}]) s_{\mathbf{k}}^{-1} s_{\mathbf{k}'}^{-1}. \end{aligned}$$

Итак,

$$\begin{aligned} H_{Qt} &= \frac{e}{mc} \sum_{\mathbf{k}l} p_{lt} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}lt} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}lt}) s_{\mathbf{k}}^{-1} + \\ &+ \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'ll'} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}lt} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}lt}) (\mathbf{A}_{\mathbf{k}'l't} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'l't}) (ll') s_{\mathbf{k}}^{-1} s_{\mathbf{k}'}^{-1}, \end{aligned}$$

где  $p_{lt}$  есть проекция  $\mathbf{p}_t$  на направление  $l$ . С помощью (73) можно выразить  $H_{Qt}$  через  $\eta_{kl}$  и  $\bar{\eta}_{kl}$  и можно опустить индекс  $t$  (что означает переход к шредингеровским динамическим переменным), так что окончательно получаем

$$\begin{aligned} H_Q &= \frac{eh^{1/2}}{4\pi^2 m} \sum_{\mathbf{k}l} p_l v_{\mathbf{k}}^{-1/2} (\eta_{kl} + \bar{\eta}_{kl}) s_{\mathbf{k}}^{-1/2} + \\ &+ \frac{e^2 h}{32\pi^4 m} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'ll'} v_{\mathbf{k}}^{-1/2} v_{\mathbf{k}'}^{-1/2} (\eta_{kl} + \bar{\eta}_{kl}) (\eta_{\mathbf{k}'l'} + \bar{\eta}_{\mathbf{k}'l'}) ll' s_{\mathbf{k}}^{-1/2} s_{\mathbf{k}'}^{-1/2}. \quad (74) \end{aligned}$$

Согласно принятой нами модели атома энергия взаимодействия есть сумма функции, линейной относительно  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ , и функции, квадратичной в этих переменных. Линейные члены приводят к процессам испускания и поглощения, а квадратичные члены — к процессам рассеяния и к таким процессам, когда одновременно поглощается или испускается два фотона. Порядок множителей  $\eta$  и  $\bar{\eta}$  в квадратичных членах не определяется в нашем способе вывода, исходящем из классической теории, но этот порядок и не является существенным, поскольку изменение порядка приводит лишь к изменению  $H_Q$  на постоянную величину.

Матричный элемент энергии  $H_Q$ , относящийся к испусканию фотона в дискретное состояние  $\mathbf{k}l$  (или, в другом обозначении, в дискретное состояние  $\mathbf{p}l'$ ), сопровождаемому



переходом атома из состояния  $\alpha^0$  в состояние  $\alpha'$ , равен, с учетом  $s_k = s_p \hbar^3$ :

$$\begin{aligned} \langle p' D | \alpha' | H_Q | \alpha^0 \rangle &= \frac{e \hbar^{1/2}}{4\pi^2 m v^{1/2}} \langle \alpha' | p_1 | \alpha^0 \rangle s_k^{-1/2} = \\ &= \frac{e}{m \hbar (2\pi v)^{1/2}} \langle \alpha' | p_1 | \alpha^0 \rangle s_p^{-1/2}. \end{aligned}$$

Входящая сюда величина  $p_1$ , относящаяся к импульсу электрона, разумеется, не имеет ничего общего с импульсом  $p$ , относящимся к фотону. Во избежание недоразумений мы заменим импульс электрона  $p$  на  $m\dot{x}$ , поскольку эти две величины представляют собой одно и то же в невозмущенном атоме. Переходя к непрерывным фотонным состояниям с помощью уравнения, сопряженного с уравнением (56), получим

$$\langle p' | \alpha' | H_Q | \alpha^0 \rangle = \frac{e}{\hbar (2\pi v)^{1/2}} \langle \alpha' | \dot{x}_1 | \alpha^0 \rangle. \quad (75)$$

Аналогично матричный элемент энергии  $H_Q$ , соответствующий поглощению фотона из состояния непрерывного спектра  $p^0 I$ , сопровождаемому переходом атома из состояния  $\alpha_0$  в состояние  $\alpha'$ , равен

$$\langle \alpha' | H_Q | p^0 I \alpha^0 \rangle = \frac{e}{\hbar (2\pi v^0)^{1/2}} \langle \alpha' | \dot{x}_1 | \alpha^0 \rangle. \quad (76)$$

Наконец, матричный элемент энергии  $H_Q$ , соответствующий рассеянию из состояния непрерывного спектра  $p^0 I^0$  в такое же состояние  $p' I'$ , причем атом переходит из состояния  $\alpha^0$  в состояние  $\alpha'$ , равен

$$\langle p' I' \alpha' | H_Q | p^0 I^0 \alpha^0 \rangle = \frac{e^2}{2\pi \hbar^2 m v^{01/2} v^{1/2}} (I' I^0) \delta_{\alpha' \alpha^0}. \quad (77)$$

При вычислении этого матричного элемента играют роль оба члена в (74). Найденные матричные элементы будут использованы в следующем параграфе. Матричные элементы, относящиеся к одновременному поглощению или испусканию двух фотонов, могут быть выписаны аналогичным образом, но они приводят к физическим эффектам, весьма слабым и не имеющим какого-либо практического значения.

### § 64. Испускание, поглощение и рассеяние излучения

Мы можем теперь непосредственно определить коэффициенты испускания, поглощения и рассеяния излучения, подставив в формулы гл. VIII величины матричных элементов (75)–(77).

Для определения вероятности испускания можно использовать формулу (56) § 54. Она показывает, что вероятность спонтанного испускания фотона в единицу времени на единицу телесного угла при переходе атома из состояния  $\alpha^0$  в состояние  $\alpha'$  с более низкой энергией равна

$$\frac{4\pi^2}{h} \frac{WP}{c^2} \left| \frac{e}{h} \frac{1}{(2\pi\nu)^{1/2}} \langle \alpha' | \hat{x}_1 | \alpha^0 \rangle \right|^2. \quad (78)$$

Далее, энергия и импульс фотона частоты  $\nu$  равны

$$W = h\nu, \quad P = \frac{h\nu}{c}.$$

Кроме того, по формуле Гейзенберга (20) § 29 имеем

$$\langle \alpha' | \hat{x}_1 | \alpha^0 \rangle = -2\pi i \nu (\alpha^0 \alpha') \langle \alpha' | x_1 | \alpha^0 \rangle,$$

где  $\nu (\alpha^0 \alpha')$  — частота, связанная с переходом из состояния  $\alpha^0$  в состояние  $\alpha'$ , равная в данном случае частоте  $\nu$  испускаемого излучения. Принимая это во внимание и подставляя написанные соотношения в (78), получим для коэффициента испускания выражение

$$\frac{(2\pi\nu)^3}{hc^3} |\langle \alpha' | ex_1 | \alpha^0 \rangle|^2. \quad (79)$$

Для того чтобы получить энергию, испускаемую с данной поляризацией в единицу времени на единицу телесного угла, нужно умножить это выражение на  $h\nu$ . Отсюда получается для энергии, испускаемой в единицу времени во всех направлениях,

$$\frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{c^3} |\langle \alpha' | ex | \alpha^0 \rangle|^2, \quad (80)$$

что согласуется с выражением (34) § 45 и оправдывает предположение Гейзенберга о физическом смысле его матричных элементов.

Аналогичным образом коэффициент поглощения, выражающийся формулой (59) § 53, принимает для фотонов вид

$$\frac{4\pi^2 h^2 W}{c^2 P} \left| \frac{e}{h} \frac{1}{(2\pi\nu)^{1/2}} \langle \alpha' | \dot{x}_1 | \alpha^0 \rangle \right|^2 = \frac{8\pi^3 \nu}{c} |\langle \alpha' | ex_1 | \alpha^0 \rangle|^2.$$

Этот коэффициент поглощения относится к падающему пучку, в котором один фотон на единичный интервал энергии пересекает в единицу времени единичную площадку. Если рассчитывать не на единичный интервал энергии, а на единичный интервал частоты, как это принято, когда имеют дело с излучением, то коэффициент поглощения принимает вид

$$\frac{8\pi^3 \nu}{hc} |\langle \alpha' | ex_1 | \alpha^0 \rangle|^2,$$

что совпадает с формулой (32) § 45, если подставить там вместо  $E_\nu$  энергию  $h\nu$  отдельного фотона. Таким образом, *элементарная теория § 45, в которой поле трактуется как внешнее возмущение, дает правильную величину коэффициента поглощения.*

О том, что должно быть согласие между элементарной теорией и той теорией, которая развивается здесь, можно было бы заключить на основании общих соображений. Обе теории различаются лишь тем, что в элементарной теории величины, описывающие поле, все коммутируют, а в развиваемой здесь теории они удовлетворяют определенным перестановочным соотношениям. Но для сильных полей это различие становится несущественным. Таким образом, при сильных полях обе теории должны давать одинаковое поглощение и испускание. Так как в обеих теориях коэффициент поглощения пропорционален интенсивности падающего пучка, то для поглощения должно быть совпадение также при слабых полях. По тем же соображениям вынужденная часть излучения, рассчитанная по данной теории, должна совпадать с излучением, рассчитанным по элементарной теории.

Рассмотрим теперь рассеяние. Коэффициент прямого рассеяния дается формулой (38) § 50. Такое рассеяние фотонов не будет сопровождаться никаким изменением состояния атома в силу присутствия множителя  $\delta_{\alpha'\alpha^0}$  в выражении матричного элемента (77). Таким образом, конечная энергия фотона  $W'$  равна его начальной энергии  $W^0$ .

Коэффициент рассеяния становится равным

$$\frac{e^4}{m^2 c^4} (1'1^0)^2.$$

Это выражение совпадает с тем, которое получается по классической механике для рассеяния излучения свободным электроном. Мы видим, таким образом, что прямое рассеяние излучения электроном в атоме не зависит от природы атомов и правильно передается классической теорией. Следует напомнить, что этот результат справедлив лишь постольку, поскольку длина волны излучения велика по сравнению с размерами атома.

Прямое рассеяние представляет собой математическое понятие и не может быть отделено экспериментально от полного рассеяния, даваемого формулой (44) § 51. Посмотрим, что представляет собой это полное рассеяние в случае фотонов. Следует быть внимательным при применении формулы (44) § 51. Сумма  $\sum_k$  в этой формуле может рассматри-

ваться как вклад в рассеяние от двойных переходов, соответствующих переходам сперва из начального состояния в состояние  $k$  и затем из состояния  $k$  в конечное состояние. Может быть так, что первым переходом будет поглощение падающего фотона, а вторым — испускание, но может оказаться и так, что первым переходом будет испускание, а вторым — поглощение. Из общего характера метода, примененного при выводе формулы (44) § 51, очевидно, что когда эта формула применяется к фотонам, в сумму  $\sum_k$

должны быть включены оба эти типа двойных переходов, хотя только первый из них принимался во внимание в выводе, данном в § 51, поскольку возможность рождения и аннигиляции частиц там не учитывалась.

Обозначим нулем, штрихом и двумя штрихами соответственно начальное, конечное и промежуточное состояния атома, а нулем и штрихом — состояния поглощенного и излученного фотона. Тогда для двойных переходов, состоящих из поглощения и последующего испускания, следует в качестве матричных элементов

$$\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle, \quad \langle p' \alpha' | V | k \rangle$$

формулы (44) § 51 взять выражения

$$\langle k | V | p^0 \alpha^0 \rangle = \langle \alpha'' | H_Q | p^0 1^0 \alpha^0 \rangle, \quad \langle p' \alpha' | V | k \rangle = \langle p' 1' \alpha' | H_Q | \alpha'' \rangle.$$

Кроме того, следует учесть, что

$$E' - E_k = h\nu^0 + H_P(\alpha^0) - H_P(\alpha'') = h[\nu^0 - \nu(\alpha''\alpha^0)],$$

где

$$h\nu(\alpha''\alpha^0) = H_P(\alpha'') - H_P(\alpha^0).$$

Аналогично для двойных переходов, состоящих из испускания и последующего поглощения, мы должны взять

$$k | V | p^0 \alpha^0 \rangle = \langle p' 1' \alpha'' | H_Q | \alpha^0 \rangle, \quad \langle p' \alpha' | V | k \rangle = \langle \alpha' | H_Q | p^0 1^0 \alpha'' \rangle$$

и учесть, что

$$\begin{aligned} E' - E_k &= h\nu^0 + H_P(\alpha^0) - H_P(\alpha'') - h\nu^0 - h\nu' = \\ &= -h[\nu' + \nu(\alpha''\alpha^0)]. \end{aligned}$$

В промежуточном состоянии здесь будут два фотона с частотами  $\nu^0$  и  $\nu'$ . Подставляя в (44) § 51 значения матричных элементов из (75)–(77), мы получим для коэффициентов рассеяния величину

$$\begin{aligned} \frac{e^4}{h^2 c^4} \frac{\nu'}{\nu^0} \left| \frac{\hbar}{m} (1' 1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0} + \right. \\ \left. + \sum_{\alpha''} \left\{ \frac{\langle \alpha' | \hat{x}_{1'} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | \hat{x}_{1^0} | \alpha^0 \rangle}{\nu^0 - \nu(\alpha''\alpha^0)} - \frac{\langle \alpha' | \hat{x}_{1^0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | \hat{x}_{1'} | \alpha^0 \rangle}{\nu' + \nu(\alpha''\alpha^0)} \right\} \right|^2. \end{aligned} \quad (81)$$

Если выражать величину (81) через  $x$ , а не через  $\hat{x}$ , то получится

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi e)^4}{h^2 c^4} \frac{\nu'}{\nu^0} \left| \frac{\hbar}{2\pi m} (1' 1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0} - \sum_{\alpha''} \nu(\alpha' \alpha'') \nu(\alpha'' \alpha^0) \times \right. \\ \left. \times \left\{ \frac{\langle \alpha' | x_{1'} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1^0} | \alpha^0 \rangle}{\nu^0 - \nu(\alpha'' \alpha^0)} - \frac{\langle \alpha' | x_{1^0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1'} | \alpha^0 \rangle}{\nu' + \nu(\alpha'' \alpha^0)} \right\} \right|^2. \end{aligned} \quad (82)$$

Выражение (82) можно упростить с помощью квантовых условий. Имеем

$$x_{1'} x_{1^0} - x_{1^0} x_{1'} = 0,$$

откуда

$$\sum_{\alpha''} \{ \langle \alpha' | x_{1'} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1^0} | \alpha^0 \rangle - \langle \alpha' | x_{1^0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1'} | \alpha^0 \rangle \} = 0, \quad (83)$$

а также

$$x_{1'} \hat{x}_{1^0} - \hat{x}_{1^0} x_{1'} = \frac{1}{m} (x_{1'} p_{1^0} - p_{1^0} x_{1'}) = \frac{i\hbar}{m} (1' 1^0),$$

откуда

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha''} \{ \langle \alpha' | x_{1'} | \alpha'' \rangle v(\alpha'' \alpha^0) \langle \alpha'' | x_{1_0} | \alpha^0 \rangle - \\ - v(\alpha' \alpha'') \langle \alpha' | x_{1_0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1'} | \alpha^0 \rangle \} = \\ = \frac{1}{2\pi i} \frac{i\hbar}{m} (1'1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0} = \frac{\hbar}{2\pi m} (1'1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0}. \quad (84) \end{aligned}$$

Умножая равенство (83) на  $v'$  и прибавляя к (84), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha''} \{ \langle \alpha' | x_{1'} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1_0} | \alpha^0 \rangle [v' + v(\alpha'' \alpha^0)] - \\ - \langle \alpha' | x_{1_0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1'} | \alpha^0 \rangle [v' + v(\alpha' \alpha'')] \} = \frac{\hbar}{2\pi m} (1'1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0}. \end{aligned}$$

Если подставить это выражение для  $\frac{\hbar}{2\pi m} (1'1^0) \delta_{\alpha' \alpha^0}$  в формулу (82), то после преобразований, использующих соотношения между частотами  $v$ , получится следующий результат:

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi e)^4}{\hbar^2 c^4} v^0 v'^0 \left| \sum_{\alpha'} \left\{ \frac{\langle \alpha' | x_{1'} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1_0} | \alpha^0 \rangle}{v^0 - v(\alpha'' \alpha^0)} - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\langle \alpha' | x_{1_0} | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | x_{1'} | \alpha^0 \rangle}{v' + v(\alpha' \alpha'')} \right\} \right|^2. \quad (85) \end{aligned}$$

Это выражение дает коэффициент рассеяния в виде рассчитанного на единицу телесного угла эффективного сечения. Найденное выражение известно под названием *дисперсионной формулы Крамерса — Гейзенберга*. Оно впервые было получено этими авторами из аналогии с классической теорией дисперсии.

Тот факт, что различные члены в выражении (82) могут быть скомбинированы таким образом, чтобы получилось выражение (85), оправдывает сделанное при выводе формулы (44) § 51 предположение, что из матричных элементов энергии взаимодействия элементы типа  $\langle p' \alpha' | V | p'' \alpha'' \rangle$  имеют второй порядок малости по сравнению с элементами типа  $\langle p' \alpha' | V | k \rangle$ , по крайней мере в том случае, когда рассеиваемыми частицами являются фотоны.

## § 65. Ансамбль фермионов

Ансамбль фермионов можно рассматривать с помощью метода, аналогичного использованному в §§ 59 и 60 для бозонов. К вектору (1) § 59 можно применить *антисимметри-*

зующий оператор  $A$ , определяемый равенством

$$A = u'!^{-1/2} \sum \pm P, \quad (2')$$

где суммирование производится по всем перестановкам  $P$ , а знак  $+$  или  $-$  берется в зависимости от того, четна или нечетна данная перестановка  $P$ . Действие оператора (21) на вектор (1) § 59 дает в результате вектор, соответствующий состоянию совокупности  $u'$  фермионов

$$u'!^{-1/2} \sum \pm P | \alpha_1^a \alpha_2^b \alpha_3^c \dots \alpha_{u'}^g \rangle = A | \alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g \rangle. \quad (3')$$

Вектор состояния (3') нормирован, если только векторы индивидуальных фермионов  $|\alpha^a\rangle$ ,  $|\alpha^b\rangle$  все различны; в противном случае он равен нулю. В этом отношении вектор (3') проще вектора (3). Однако вектор (3') сложнее вектора (3) в том отношении, что (3') зависит от порядка, в котором в него входят величины  $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c \dots$ , так как он меняет знак при применении нечетной перестановки к расположению этих величин.

Мы можем, как и раньше, ввести числа  $n_1, n_2, n_3 \dots$  фермионов в состояниях  $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \alpha^{(3)} \dots$  и рассматривать их как динамические переменные или наблюдаемые. Каждая из них имеет в качестве собственных значений только 0 и 1. Они образуют полный набор коммутирующих переменных для собрания фермионов. В качестве базисных векторов представления с диагональными  $n'$  можно взять те, которые связаны с векторами (3') уравнением

$$A | \alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g \rangle = \pm | n'_1 n'_2 n'_3 \dots \rangle, \quad (6')$$

соответствующим (6), причем переменные  $n'$  связаны с переменными  $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c \dots$  уравнением (4). Знак  $\pm$  необходим в (6') в силу того, что при данном  $n'$  фиксированы только занятые состояния  $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c \dots$ , но не их порядок, так что знак левой части (6') не фиксирован. Для того чтобы установить правило, определяющее знак в (6'), нужно расположить все состояния фермионов  $\alpha$  в некотором порядке, принимаемом за нормальный. Величины  $\alpha$ , входящие в левую часть (6'), образуют некоторую выборку из всех  $\alpha$ , и стандартный порядок для всех  $\alpha$  даст и нормальный порядок для выборки. Примем за правило, что в формуле (6') нужно брать знак  $+$ , если величины  $\alpha$  в левой части могут быть приведены к нормальному порядку четной перестановки и знак  $-$ , если для этого необходима нечетная перестановка.

Ввиду сложности этого правила представление с помощью базисного вектора  $|n'_1 n'_2 n'_3 \dots\rangle$  мало пригодно.

Если число фермионов в ансамбле переменного, то можно ввести полный набор векторов

$$| \rangle, |\alpha^a\rangle, A|\alpha^a \alpha^b\rangle, A|\alpha^a \alpha^b \alpha^c\rangle \dots, \quad (9')$$

соответствующий (9). Вектор состояния общего вида может быть выражен как сумма различных векторов (9').

Продолжая дальше, мы введем набор линейных операторов  $\eta$ ,  $\bar{\eta}$ , причем каждому фермионному состоянию  $\alpha^a$  соответствует одна пара  $\eta_a$ ,  $\bar{\eta}_a$ . Операторы должны удовлетворять перестановочным соотношениям

$$\left. \begin{aligned} \eta_a \eta_b + \eta_b \eta_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a \bar{\eta}_b + \bar{\eta}_b \bar{\eta}_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a \bar{\eta}_b + \eta_b \bar{\eta}_a &= \delta_{ab}. \end{aligned} \right\} \quad (11')$$

Эти соотношения похожи на (11), но имеют в левой части знак  $+$  вместо знака  $-$ . Они показывают, что при  $a \neq b$  операторы  $\eta_a$  и  $\bar{\eta}_a$  антикоммутируют с операторами  $\eta_b$  и  $\bar{\eta}_b$ ; если же положить  $b = a$ , то из (11') следует

$$\eta_a^2 = 0, \quad \bar{\eta}_a^2 = 0, \quad \eta_a \bar{\eta}_a + \bar{\eta}_a \eta_a = 1. \quad (11'')$$

Для доказательства совместности соотношений (11') заметим, что линейные операторы  $\eta$ ,  $\bar{\eta}$ , удовлетворяющие условиям (11'), могут быть построены следующим образом. Для каждого состояния  $\alpha^a$  мы возьмем набор линейных операторов  $\sigma_{xa}$ ,  $\sigma_{ya}$ ,  $\sigma_{za}$ , аналогичных тем операторам  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ , которые были введены в § 37 для описания спина электрона, и таких, что при  $b \neq a$  операторы  $\sigma_{xa}$ ,  $\sigma_{ya}$ ,  $\sigma_{za}$  коммутируют с  $\sigma_{xb}$ ,  $\sigma_{yb}$ ,  $\sigma_{zb}$ . Мы введем также независимую совокупность линейных операторов  $\xi_a$  по одному на каждое состояние  $\alpha^a$  и потребуем, чтобы они антикоммутировали друг с другом, чтобы квадрат каждого из них был равен единице и чтобы они коммутировали со всеми переменными  $\tau$ . Тогда, если положить

$$\eta_a = \frac{1}{2} \xi_a (\sigma_{xa} - i\sigma_{ya}), \quad \bar{\eta}_a = \frac{1}{2} \xi_a (\sigma_{xa} + i\sigma_{ya}),$$

то все соотношения (11') будут удовлетворяться.

Из (11') следует

$$(\eta_a \bar{\eta}_a)^2 = \eta_a \bar{\eta}_a \eta_a \bar{\eta}_a = \eta_a (1 - \eta_a \bar{\eta}_a) \bar{\eta}_a = \eta_a \bar{\eta}_a.$$



Это есть алгебраическое уравнение для  $\eta_a \bar{\eta}_a$ ; оно показывает, что  $\eta_a \bar{\eta}_a$  является наблюдаемой с собственными значениями 0 и 1. Кроме того,  $\eta_a \bar{\eta}_a$  коммутирует с  $\eta_b \bar{\eta}_b$  при  $b \neq a$ . Этот результат позволяет положить

$$\eta_a \bar{\eta}_a = n_a, \quad (12')$$

что совпадает с формулой (12). Из формулы (11'') мы получим тогда

$$\bar{\eta}_a \eta_a = 1 - n_a, \quad (13')$$

что соответствует формуле (13).

Обозначим через  $|0\rangle$  нормированный вектор, являющийся общим собственным вектором всех  $n$ , для собственных значений нуль. Тогда будет

$$n_a |0\rangle = 0$$

и на основании (12')

$$\langle 0 | \eta_a \bar{\eta}_a | 0 \rangle = 0,$$

отсюда

$$\bar{\eta}_a |0\rangle = 0 \quad (15')$$

аналогично (15).

Кроме того, имеет место равенство

$$\langle 0 | \bar{\eta}_a \eta_a | 0 \rangle = \langle 0 | (1 - n_a) | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1,$$

означающее, что вектор  $\eta_a |0\rangle$  нормирован, и равенство

$$n_a \eta_a |0\rangle = \eta_a \bar{\eta}_a \eta_a |0\rangle = \eta_a (1 - n_a) |0\rangle = \eta_a |0\rangle,$$

означающее, что вектор  $\eta_a |0\rangle$  является собственным вектором  $n_a$  для собственного значения единица. Он является вместе с тем собственным вектором других  $n$  для нулевых собственных значений, так как другие  $n$  коммутируют с  $\eta_a$ . Обобщая доказательство, можно заключить, что вектор  $\eta_a \eta_b \eta_c \dots \eta_g |0\rangle$  нормирован и является общим собственным вектором всех  $n$ , соответствующим собственным значениям, равным единице для  $n_a, n_b, n_c, \dots, n_g$  и равным нулю для других  $n$ . Следовательно, можно считать, что

$$A |\alpha^a \alpha^b \alpha^c \dots \alpha^g\rangle = \eta_a \eta_b \eta_c \dots \eta_g |0\rangle. \quad (17')$$

Обе части равенства антисимметричны в индексах  $a, b, c, \dots, g$ . Мы имеем здесь аналогию с (17).

Если перейти к другому набору базисных векторов  $|\beta^A\rangle$  для фермиона, то можно ввести новый набор линейных опе-

раторов  $\eta_a$ , соответствующих этим базисным векторам. На основании тех же соображений, что и в случае бозонов, мы найдем тогда, что новые  $\eta$  связаны с первоначальными  $\eta$  соотношением (21). Отсюда видно, что возможна процедура вторичного квантования и для фермионов. Эта процедура аналогична процедуре для бозонов с единственной разницей, что для фермионов должны использоваться перестановочные соотношения (11') вместо перестановочных соотношений (11) для бозонов.

Симметричный линейный оператор  $U_T$  вида (22) может быть выражен через переменные  $\eta$ ,  $\bar{\eta}$  с помощью метода, аналогичного тому, который применялся для бозонов. По-прежнему будут справедливы уравнения (24) и (25), только оператор  $S$  заменяется в (25) на оператор  $A$ . Вместо уравнения (26) мы теперь имеем

$$\begin{aligned} U_T \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots |0\rangle &= \sum_a \sum_r (-)^{r-1} \eta_a \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots |0\rangle \langle a | U | x_r \rangle = \\ &= \sum_{ab} \eta_a \sum_r (-)^{r-1} \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots |0\rangle \delta_{bx_r} \langle a | U | b \rangle. \end{aligned} \quad (26')$$

Символ  $\eta_{x_r}^{-1}$  означает, что множитель  $\eta_{x_r}$  должен быть опущен, причем до его вычеркивания положение его относительно других  $\eta_x$  должно оставаться прежним. Вместо соотношения (27) имеем теперь

$$\bar{\eta}_b \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots |0\rangle = \sum_r (-)^{r-1} \eta_{x_r}^{-1} \eta_{x_1} \eta_{x_2} \dots |0\rangle \delta_{bx_r}. \quad (27')$$

Таким образом, формула (28), а значит и (29), сохраняется без изменения. В случае фермионов мы имеем для  $U_T$  тот же окончательный вид (29), что и в случае бозонов. Так же точно симметричный линейный оператор  $V_T$  типа (30) может быть выражен в виде

$$V_T = \sum_{abcd} \eta_a \eta_b \langle ab | V | cd \rangle \bar{\eta}_a \bar{\eta}_c, \quad (35')$$

что соответствует одной из форм записи равенства (35).

Предыдущее рассмотрение показывает, что имеется глубокая аналогия между теорией фермионов и теорией бозонов; при переходе одних к другим нужно сделать в общих уравнениях лишь небольшие изменения.

В теории фермионов имеется, однако, деталь, не имеющая аналогии в теории бозонов. Для фермионов существуют только две возможности: занятое и свободное состояние, и *между этими двумя возможностями существует симметрия*.

Эту симметрию можно показать математически, производя преобразование, меняющее местами понятия «занято» и «свободно», именно

$$\begin{aligned}\eta_a^* &= \bar{\eta}_a, & \bar{\eta}_a^* &= \eta_a, \\ n_a^* &= \eta_a^* \bar{\eta}_a^* &= 1 - n_a.\end{aligned}$$

Операторы рождения для переменных, не отмеченных звездочкой, являются операторами уничтожения для переменных, отмеченных звездочкой, и наоборот. Переменные, отмеченные звездочкой, удовлетворяют тем же квантовым условиям и имеют все те же свойства, что и переменные без звездочки.

Если имеется только несколько незанятых состояний, то удобным стандартным вектором будет такой, для которого все состояния заняты, именно,  $|0^*\rangle$ . Этот вектор удовлетворяет соотношению

$$n_a |0^*\rangle = |0^*\rangle.$$

Следовательно, он удовлетворяет и соотношению

$$n_a^* |0^*\rangle = 0$$

или

$$\bar{\eta}_a^* |0^*\rangle = 0.$$

Прочие состояния системы будут тогда представлены векторами типа

$$\eta_a^* \eta_b^* \eta_c^* \dots |0^*\rangle.$$

В них входят переменные, относящиеся к незанятым фермионным состояниям  $a, b, c \dots$  Можно рассматривать эти незанятые фермионные состояния как дырки в занятых состояниях, а переменные  $\eta^*$  — как операторы рождения дырок. Дырки являются объектами столь же физическими, как и исходные частицы, и сами являются фермионами.

## ГЛАВА XI

### РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОНА

#### § 66. Релятивистское рассмотрение частицы

Теория, которую мы строили до сих пор, была существенно нерелятивистской. Мы работали все время в одной и той же лоренцевой системе отсчета и строили теорию по аналогии с классической нерелятивистской динамикой. Попытаемся теперь сделать теорию инвариантной относительно преобразований Лоренца так, чтобы она удовлетворяла частному принципу относительности. Это необходимо для того, чтобы теорию можно было применять к быстро движущимся частицам. Нет нужды согласовывать излагаемую теорию с общей теорией относительности, так как общая теория относительности нужна только при рассмотрении тяготения, а в атомных явлениях силы тяготения совершенно несущественны.

Посмотрим, как можно приспособить основные положения квантовой механики к релятивистской точке зрения, согласно которой четыре измерения пространства, времени должны рассматриваться единообразно. Общий принцип суперпозиции состояний в том виде, как он изложен в гл. I, является релятивистским принципом, поскольку он применим к «состояниям» в пространственно-временном понимании, соответствующем теории относительности. Однако общее понятие наблюдаемой не согласуется с теорией относительности, поскольку наблюдаемая может быть связана с физическими объектами в удаленных друг от друга точках в один и тот же момент времени. Следовательно, если иметь дело с общим представлением, относящимся к какому-нибудь полному набору коммутирующих наблюдаемых, то в теории не может проявиться релятивистская симметрия времени и пространства. В релятивистской квантовой механике приходится довольствоваться одним представлением,

в котором проявляется эта симметрия. Можно затем перейти к другому представлению, относящемуся к частной лоренцевой системе отсчета, если это полезно для конкретных расчетов.

В задаче о движении одной частицы, для того чтобы проявлялась симметрия пространства и времени, нужно пользоваться шредингеровским представлением. Мы будем писать  $x_1, x_2, x_3$  вместо  $x, y, z$  и  $x_0$  вместо  $ct$ . Зависящая от времени волновая функция принимает вид  $\psi(x_0 x_1 x_2 x_3)$  и дает нам основание для единообразного рассмотрения всех четырех  $x$ .

Мы будем употреблять релятивистские обозначения, записывая четыре величины  $x$  в виде  $x_\mu$  ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ). Пространственно-временной вектор с четырьмя компонентами, преобразующимися при преобразованиях Лоренца, как четыре величины  $dx_\mu$ , будем обозначать буквой с греческим индексом внизу, например  $a_\mu$ . Можно поднять индекс по правилу

$$a^0 = a_0, \quad a^1 = -a_1, \quad a^2 = -a_2, \quad a^3 = -a_3. \quad (1)$$

Величины  $a_\mu$  называются контравариантными компонентами вектора  $a$ , а  $a^\mu$  — ковариантными \*). Два вектора имеют скалярное произведение

$$a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3 = a^\mu b_\mu = a_\mu b^\mu,$$

где по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Это скалярное произведение инвариантно по отношению к преобразованию Лоренца. Определим фундаментальный тензор равенствами

$$\left. \begin{aligned} g^{00} = 1, \quad g^{11} = g^{22} = g^{33} = -1, \\ g^{\mu\nu} = 0 \text{ при } \mu \neq \nu. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Пользуясь им, можно записать правила (1), связывающие контравариантные и ковариантные компоненты, в виде

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu.$$

В шредингеровском представлении импульс (компоненты которого мы будем обозначать  $p_1, p_2, p_3$  вместо  $p_x, p_y, p_z$ ) соответствует оператору

$$p_r = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_r} \quad (r = 1, 2, 3). \quad (3)$$

\*) Обычно для ковариантных компонент употребляются, наоборот, нижние значки, а для контравариантных — верхние, (Прим. В. А. Фока.)

С другой стороны, четыре оператора  $\partial/\partial x_\mu$  образуют ковариантные компоненты четырехмерного вектора, у которого контравариантные компоненты имеют вид  $\partial/\partial x^\mu$ . Для того чтобы перенести (3) в релятивистскую теорию, мы должны сначала написать это соотношение с согласованными индексами

$$p_r = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^r}$$

и затем дополнить его до четырехмерного векторного уравнения

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \quad (4)$$

Следовательно, нужно ввести новую динамическую переменную  $p_0$  с оператором  $\partial/\partial x_0$ .

Так как в комбинации с импульсами  $p_r$  она образует четырехмерный вектор, то она должна иметь смысл энергии частицы, деленной на  $c$ . Мы можем приступить к построению теории, в которой четыре величины  $p$  рассматриваются равноправно, аналогично четырем величинам  $x$ .

В теории электрона, которая будет здесь развита, нам придется ввести новые степени свободы, описывающие внутреннее движение электрона. Следовательно, волновая функция должна содержать наряду с четырьмя  $x$  новые переменные.

## § 67. Волновое уравнение для электрона

Рассмотрим сначала случай движения электрона в отсутствие электромагнитного поля, т. е. задачу о движении свободной частицы, аналогичную рассмотренной в § 30, но с возможным добавлением внутренних степеней свободы. Релятивистская функция Гамильтона для рассматриваемой системы, даваемая классической механикой, выражается уравнением (29) § 30 и приводит к волновому уравнению

$$\{p_0 - (m^2 c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{1/2}\} \psi = 0, \quad (5)$$

где уже нужно толковать величины  $p$ , как операторы, согласно уравнениям (4). Хотя в уравнении (5) и учтена релятивистская связь между импульсом и энергией, оно все же неудовлетворительно с точки зрения релятивистской теории. Оно столь несимметрично относительно  $p_0$  и других  $p$ , что невозможно обобщить его релятивистским образом на

случай, когда имеется поле. Мы должны поэтому искать другое уравнение.

Если умножить волновое уравнение (5) слева на оператор  $\{p_0 + (m^2c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{1/2}\}$ , то получится уравнение

$$\{p_0^2 - m^2c^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2\} \psi = 0, \quad (6)$$

которое релятивистски инвариантно и является удобным в качестве основы для построения релятивистской теории. Уравнение (6) не вполне эквивалентно уравнению (5), потому что, хотя каждое решение (5) есть решение (6), но обратное неверно. Только те решения (6), которые соответствуют положительным значениям  $p_0$ , являются также решениями (5).

Вид волнового уравнения (6) не согласуется с общими положениями квантовой теории, поскольку оно квадратично относительно  $t$ , тогда как в § 27 мы из весьма общих соображений вывели, что волновое уравнение должно быть линейным относительно оператора  $\partial/\partial t$  или  $p_0$ , т. е. должно быть вида (7) § 27. Поэтому мы будем искать уравнение, линейное относительно  $p_0$  и в общих чертах эквивалентное (6). Для того, чтобы это волновое уравнение преобразовывалось простым образом при преобразовании Лоренца, попытаемся сделать его рациональным и линейным относительно  $p_1, p_2, p_3$  и  $p_0$ . Другими словами, положим

$$\{p_0 - \alpha_1 p_1 - \alpha_2 p_2 - \alpha_3 p_3 - \beta\} \psi = 0, \quad (7)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  не зависят от  $p$ . Так как мы рассматриваем случай отсутствия поля, все точки пространства-времени должны быть равноправны, и оператор в волновом уравнении не должен содержать величин  $x$ . Следовательно,  $\alpha$  и  $\beta$  также не должны зависеть от величин  $x$ , так что они коммутируют с  $p$  и с  $x$ . Поэтому  $\alpha$  и  $\beta$  описывают некоторые новые степени свободы, относящиеся к какому-то внутреннему движению электрона. Мы увидим позднее, что они позволяют ввести спин электрона. Умножая уравнение (7) слева на оператор  $\{p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta\}$ , мы получим

$$\left\{ p_0^2 - \sum_{123} [\alpha_1^2 p_1^2 + (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) p_1 p_2 + (\alpha_1 \beta + \beta \alpha_1) p_1] - \beta^2 \right\} \psi = 0,$$

где  $\sum_{123}$  берется по циклической перестановке индексов 1, 2, 3. Это выражение совпадает с (6), если  $\alpha$  и  $\beta$  будут

удовлетворять соотношениям

$$\begin{aligned}\alpha_1^2 &= 1, & \alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 &= 0, \\ \beta^2 &= m^2c^2, & \alpha_1\beta + \beta\alpha_1 &= 0,\end{aligned}$$

а также соотношениям, получающимся отсюда циклической перестановкой индексов 1, 2, 3. Если положить

$$\beta = \alpha_m mc,$$

то эти соотношения могут быть объединены в одно

$$\alpha_a\alpha_b + \alpha_b\alpha_a = 2\delta_{ab} \begin{pmatrix} a, b = 1, 2, 3 \\ \text{или } m \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Четыре величины  $\alpha$  антикоммутируют друг с другом, и квадраты их равны единице.

Итак, придавая величинам  $\alpha$  и  $\beta$  подходящие свойства, можно сделать волновое уравнение (7) эквивалентным (6), по крайней мере, поскольку дело касается движения электрона как целого. Мы можем теперь предположить, что (7) есть правильное релятивистское волновое уравнение для движения электрона в отсутствие поля. Это приводит, однако, к одной трудности, вызванной тем фактом, что уравнение (7), аналогично (6), не является в точности эквивалентным уравнению (5), но допускает также и решения, соответствующие отрицательным значениям  $p_0$ , а не только положительным. Первые, разумеется, не соответствуют какому-либо действительно наблюдаемому движению электрона. Пока мы будем рассматривать только решения с положительной энергией и отложим обсуждение решений с отрицательной энергией до § 73.

Представление для четырех величин  $\alpha$  получается легко. Эти величины имеют алгебраические свойства, аналогичные величинам, введенным в § 37 и допускающим представление матрицами с двумя строками и столбцами. Пока мы ограничиваемся двухрядными матрицами, мы не можем получить представление более чем для трех антикоммутирующих величин, и для того, чтобы получить представление для четырех антикоммутирующих величин  $\alpha$ , мы должны перейти к четырехрядным матрицам. Удобно сначала выразить величины  $\alpha$  через  $\sigma$  и через другой аналогичный набор трех антикоммутирующих переменных  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ , квадрат кото-



рых равен единице и которые не зависят от  $\sigma$  и коммутируют с ними. Можно взять, например,

$$\alpha_1 = \rho_1 \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_1 \sigma_2, \quad \alpha_3 = \rho_1 \sigma_3, \quad \alpha_m = \rho_3, \quad (9)$$

и тогда легко показать, что  $\alpha$  будут удовлетворять всем соотношениям (8). Если ввести представление, в котором диагональны  $\rho_3$  и  $\sigma_3$ , то мы получим следующую схему матриц:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Следует заметить, что матрицы  $\rho$  и  $\sigma$  являются эрмитовыми, так что матрицы  $\alpha$  также эрмитовы.

Соответственно четырем строкам и столбцам волновая функция  $\psi$  должна содержать переменную, принимающую четыре значения; тогда можно умножать на нее матрицу. Иначе говоря, можно считать волновую функцию четырехкомпонентной, причем каждая компонента есть функция только от четырех величин  $x$ . Мы видели в § 37, что спин электрона требует двухкомпонентной волновой функции. Тот факт, что наша теория дает четырехкомпонентную функцию, вызван тем, что волновое уравнение (7) имеет вдвое больше решений, чем должно быть, и половина из них соответствует состояниям с отрицательной энергией.

С помощью (9) волновое уравнение (7) может быть переписано в трехмерных векторных обозначениях следующим образом \*):

$$\{\rho_0 - \rho_1(\sigma, \mathbf{p}) - \rho_3 mc\} \psi = 0. \quad (10)$$

Для того чтобы обобщить это уравнение на случай присутствия электромагнитного поля, мы, следуя классическому правилу, заменим  $\rho_0$  и  $\mathbf{p}$  на  $\rho_0 + \frac{e}{c} A_0$  и  $\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$ , где  $A_0$  и  $\mathbf{A}$  — скалярный и векторный потенциалы поля в месте нахождения электрона. Это дает нам уравнение

$$\left\{ \rho_0 + \frac{e}{c} A_0 - \rho_1 \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) - \rho_3 mc \right\} \psi = 0, \quad (11)$$

которое и является основным волновым уравнением релятивистской теории электрона.

Четыре компоненты  $\psi$  в (10) или (11) следует представлять себе написанными одна под другой так, чтобы получилась матрица с одним столбцом. Тогда квадратные матрицы  $\rho$  и  $\sigma$  умножаются на столбцы  $\psi$  согласно правилу умножения матриц, и произведение в каком случае опять будет матрицей с одним столбцом. Сопряженную волновую функцию, которая является бра-вектором, следует изображать в виде четырех компонент, написанных одна рядом с другой, так, чтобы получилась матрица с одной строкой. Обозначим сопряженную волновую функцию, изображаемую матрицей с одной строкой через  $\psi^+$ , употребляя знак  $+$  для обозначения транспонирования матрицы, т. е. замены строк столбцами. Тогда сопряженное по отношению к (11) уравнение будет иметь вид

$$\bar{\psi}^+ \left\{ \rho_0 + \frac{e}{c} A_0 - \rho_1 \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) - \rho_3 mc \right\} = 0, \quad (12)$$

где операторы  $\rho$  действуют на функцию, стоящую слева. Оператор дифференцирования, действующий налево, следует интерпретировать согласно (24) § 22.

---

\*) Уравнение (10) и его обобщение на случай присутствия электромагнитного поля было установлено Дираком и носит его имя. Четырехрядные матрицы  $\alpha_i$ ,  $\beta$  (а также  $\rho_i$ ,  $\sigma_i$ ) называются матрицами Дирака. (Прим. перев.)

### § 68. Инвариантность относительно преобразований Лоренца

Прежде чем переходить к обсуждению физических следствий волнового уравнения (11) или (12), мы проверим, действительно ли наша теория инвариантна относительно преобразований Лоренца, или, точнее говоря, что физические результаты, к которым приводит теория, не зависят от используемой лоренцевой системы отсчета. Это ни в какой мере не является очевидным. Нужно показать, что если выписать волновое уравнение в другой лоренцевой системе, то решение нового уравнения может быть приведено во взаимно однозначное соответствие с первоначальным таким образом, что соответствующие решения могут считаться представляющими одно и то же состояние. Для каждой из этих двух лоренцевых систем квадрат модуля волновой функции, просуммированный по четырем компонентам, должен давать рассчитанную на единицу объема вероятность нахождения электрона в определенной точке в данной лоренцевой системе. Можно назвать эту величину *плотностью вероятности*. Ее значения, вычисленные в различных лоренцевых системах с помощью волновых функций, представляющих то же самое состояние, должны быть связаны друг с другом так же, как временные компоненты некоторого четырехмерного вектора. Далее, четырехмерная дивергенция этого вектора должна исчезать, что означает сохранение электрона, т. е. тот факт, что электрон не может появиться или исчезнуть в некотором объеме, не проходя через границу.

Для краткости удобно ввести обозначение  $\alpha_0 = 1$  и предположить, что индексы  $\alpha_\mu$  ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ) могут быть поданы согласно правилам (1), хотя эти четыре  $\alpha_\mu$  и не образуют компонент четырехмерного вектора. Можно написать теперь уравнение (11) в виде

$$\left\{ \alpha^\mu \left( p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu \right) - \alpha_m m c \right\} \psi = 0. \quad (13)$$

Четыре  $\alpha^\mu$  удовлетворяют соотношениям

$$\alpha^\mu \alpha_m \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha_m \alpha^\mu = 2 g^{\mu\nu} \alpha_m, \quad (14)$$

где  $g^{\mu\nu}$  определено в (2); это можно проверить, рассматривая раздельно случаи, когда  $\mu$  и  $\nu$  оба равны нулю, когда

одно из них равно нулю и когда ни одно из них не равно нулю.

Произведем бесконечно малое преобразование Лоренца и отметим величины, относящиеся к новой системе, звездочкой. Компоненты четырехмерного вектора  $p_\mu$  будут преобразовываться согласно уравнениям вида

$$p_\mu^* = p_\mu + a_\mu^\nu p_\nu, \quad (15)$$

где  $a_\mu^\nu$  — величины первого порядка малости. Будем пренебрегать величинами, квадратичными по  $a$  и имеющими второй порядок малости. Для того чтобы имели место преобразования Лоренца, должно быть выполнено условие

$$p_\mu^* p^{\mu*} = p_\mu p^\mu,$$

отсюда следуют соотношения

$$a_\mu^\nu p_\nu p^\mu + p_\mu a^{\mu\nu} p_\nu = 0,$$

которые дают

$$a^{\mu\nu} + a^{\nu\mu} = 0. \quad (16)$$

Компоненты  $A_\mu$  преобразуются по тому же закону, так что

$$p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu = p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^* - a_\mu^\nu \left( p_\nu^* + \frac{e}{c} A_\nu^* \right).$$

Следовательно, волновое уравнение (13) принимает вид

$$\left\{ (\alpha^\mu - \alpha^\lambda a_\lambda^\mu) \left( p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^* \right) - \alpha_m mc \right\} \psi = 0. \quad (17)$$

Введем величину

$$M = \frac{1}{4} a_{\rho\sigma} \alpha^\rho \alpha_m \alpha^\sigma. \quad (18)$$

Тогда из соотношения (14) с помощью (16) получим

$$\begin{aligned} \alpha^\mu \alpha_m M - M \alpha_m \alpha^\mu &= \\ &= \frac{1}{4} a_{\rho\sigma} \{ \alpha^\mu \alpha_m \alpha^\rho + \alpha^\rho \alpha_m \alpha^\mu \} \alpha_m \alpha^\sigma - \alpha^\rho \alpha_m \{ \alpha^\mu \alpha_m \alpha^\sigma + \alpha^\sigma \alpha_m \alpha^\mu \} = \\ &= \frac{1}{2} a_{\rho\sigma} (g^{\mu\rho} \alpha^\sigma - \alpha^\rho g^{\mu\sigma}) = -a_\rho^\mu \alpha^\rho \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\alpha^\mu (1 + \alpha_m M) = (1 + M \alpha_m) (\alpha^\mu - a_\rho^\mu \alpha^\rho). \quad (19)$$

Умножив (17) слева на  $(1 + M \alpha_m)$ , получаем

$$\left\{ \alpha^\mu (1 + \alpha_m M) \left( p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^* \right) - (\alpha_m + M) mc \right\} \psi = 0.$$

Таким образом, если мы положим

$$(1 + \alpha_m M) \psi = \psi^*, \quad (20)$$

то получим

$$\left\{ \alpha^\mu \left( p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^* \right) - \alpha_m mc \right\} \psi^* = 0. \quad (21)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и уравнение (13), в котором переменные  $p_\mu$ ,  $A_\mu$ ,  $\psi$  снабжены звездочкой  $p_\mu^*$ ,  $A_\mu^*$ ,  $\psi^*$ . Оно показывает, что уравнение (13) инвариантно относительно бесконечно малого преобразования Лоренца при условии, что  $\psi$  преобразуется согласно правилу (20). Конечное преобразование Лоренца может быть построено из бесконечно малых, и поэтому уравнение (13) инвариантно также и по отношению к конечным преобразованиям Лоренца. Заметим, что матрицы  $\alpha^\mu$  вообще не меняются.

Инвариантность, доказанная выше, означает, что решения  $\psi$  исходного уравнения (13) находятся во взаимно однозначном соответствии с решениями  $\psi^*$  нового уравнения (21), причем соответствующие решения связаны соотношениями (20). Мы полагаем, что соответствующие решения представляют одно и то же физическое состояние. Теперь нужно убедиться в том, что физические интерпретации соответствующих решений, отнесенных каждое к своей лоренцевой системе, согласуются друг с другом. Нужно, чтобы  $\bar{\psi}^+ \psi$  давало плотность вероятности в исходной системе, а  $\bar{\psi}^{*+} \psi^*$  — плотность вероятности, отнесенную к новой системе. Рассмотрим соотношение между этими величинами. Символ  $\bar{\psi}^+ \psi$  означает то же самое, что и  $\bar{\psi}^+ \alpha^0 \psi$ , и представляет собой одну из четырех величин, которые должны рассматриваться совместно.

Уравнения (18) и (16) показывают, что величина  $M$  чисто мнима. Следовательно, уравнение, сопряженное с уравнением (20), будет иметь вид

$$\bar{\psi}^{*+} = \bar{\psi}^+ (1 - M \alpha_m).$$

Отсюда, учитывая (19), имеем

$$\begin{aligned} \bar{\psi}^{*+} \alpha^\mu \psi^* &= \bar{\psi}^+ (1 - M \alpha_m) \alpha^\mu (1 + \alpha_m M) \psi = \\ &= \bar{\psi}^+ (1 - M \alpha_m) (1 + M \alpha_m) (\alpha^\mu - a_\nu^\mu \alpha^\nu) \psi. \end{aligned}$$

Это сводится с помощью (16) к соотношению

$$\bar{\psi}^{*+} \alpha^\mu \psi^* = \bar{\psi}^+ (\alpha^\mu - a_\nu^\mu \alpha^\nu) \psi = \bar{\psi}^+ \alpha^\mu \psi + a_\nu^\mu \bar{\psi}^+ \alpha^\nu \psi.$$

Если спустить здесь индекс  $\mu$ , то получится уравнение такого же вида, как и (15), откуда видно, что четыре величины  $\bar{\psi}^+ \alpha_\mu \psi$  преобразуются как контравариантные компоненты четырехмерного вектора. Следовательно,  $\bar{\psi}^+ \psi$  преобразуется как временная компонента четырехмерного вектора, что является правильным законом преобразования для плотности вероятности. Пространственные компоненты четырехмерного вектора, именно  $\bar{\psi}^+ \alpha_r \psi$ , будучи умноженными на  $c$ , дают поток вероятности или вероятность прохождения электрона через единичную площадку в единицу времени.

Следует отметить, что выражение  $\bar{\psi}^+ \alpha_m \psi$  является инвариантным в силу соотношения

$$\bar{\psi}^{*+} \alpha_m \psi^* = \bar{\psi}^+ (1 - M \alpha_m) \alpha_m (1 + \alpha_m M) \psi = \bar{\psi}^+ \alpha_m \psi.$$

В заключение нужно проверить выполнение закона сохранения, состоящего в том, что дивергенция

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi}^+ \alpha_\mu \psi) \quad (22)$$

обращается в нуль. Для того чтобы это сделать, умножим (13) слева на  $\bar{\psi}^+$ . Получим

$$\bar{\psi}^+ \alpha^\mu \left( i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} + \frac{e}{c} A_\mu \psi \right) - \bar{\psi}^+ \alpha_m m c \psi = 0.$$

Сопряженное уравнение имеет вид

$$\left( -i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}^+}{\partial x^\mu} + \bar{\psi}^+ \frac{e}{c} A_\mu \right) \alpha^\mu \psi - \bar{\psi}^+ \alpha_m m c \psi = 0.$$

Вычитая одно из другого и разделив на  $i\hbar$ , получим

$$\bar{\psi}^+ \alpha^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} + \frac{\partial \bar{\psi}^+}{\partial x^\mu} \alpha^\mu \psi = 0,$$

что как раз и выражает обращение (22) в нуль. Таким образом, мы завершили доказательство того, что наша теория дает согласующиеся результаты, в какой бы системе отсчета она ни применялась.

## § 69. Движение свободного электрона

Интересно рассмотреть движение свободного электрона согласно вышезложенной теории в гейзенберговской картине и исследовать гейзенберговские уравнения движения.

Эти уравнения можно проинтегрировать точно, что впервые сделал Шредингер \*). Для краткости будем опускать индекс  $t$ , который, если следовать обозначениям § 28, должен был бы выписываться при динамической переменной, изменяющейся во времени по гейзенберговской картине.

В качестве оператора Гамильтона следует взять выражение, которое, действуя на  $\psi$ , удовлетворяющее уравнению (10), дает то же, что оператор  $cp_0$ , примененный к  $\psi$ . Это выражение есть

$$H = cp_1(\sigma, p) + p_3 mc^2 = c(\alpha, p) + p_3 mc^2. \quad (23)$$

Сразу видно, что импульс коммутирует с  $H$  и, следовательно, является интегралом движения. Далее, проекция скорости на ось  $x_1$  равна

$$\dot{x}_1 = [x_1, H] = c\alpha_1. \quad (24)$$

Это результат довольно неожиданный, так как он означает совершенно другое соотношение между скоростью и импульсом, чем в классической механике. Он, однако, согласуется с выражением  $\bar{\psi}^+ \alpha_1 \psi$  для компоненты потока вероятности. Величина  $\dot{x}_1$ , даваемая (24), имеет собственные значения  $\pm c$ , соответственно собственным значениям  $\pm 1$  для  $\alpha_1$ . Поскольку аналогичный результат получается для  $\dot{x}_2$  и  $\dot{x}_3$ , мы можем заключить, что *измерение проекции скорости свободного электрона всегда приводит к результату  $\pm c$* . Легко убедиться, что это заключение остается в силе также в присутствии поля.

Поскольку электроны, наблюдаемые на практике, имеют скорости существенно меньшие скорости света, то может показаться, что мы имеем здесь противоречие с экспериментом. Это, однако, не является действительным противоречием, поскольку теоретическая скорость в вышеприведенном заключении есть скорость в определенный момент времени, тогда как наблюдаемые скорости всегда являются средними скоростями по некоторому конечному интервалу времени. В дальнейшем при рассмотрении уравнений движения будет показано, что скорость вообще не является постоянной, но быстро осциллирует вокруг среднего значения, которое согласуется с наблюдаемой величиной.

---

\*) Schrödinger, Sitzungsab. d. Berlin. Akad., 1930, p. 418.

рых равен единице и которые не зависят от  $\sigma$  и коммутируют с ними. Можно взять, например,

$$\alpha_1 = \rho_1 \sigma_1, \alpha_2 = \rho_1 \sigma_2, \alpha_3 = \rho_1 \sigma_3, \alpha_m = \rho_3, \quad (9)$$

и тогда легко показать, что  $\alpha$  будут удовлетворять всем соотношениям (8). Если ввести представление, в котором диагональны  $\rho_3$  и  $\sigma_3$ , то мы получим следующую схему матриц:

$$\sigma_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{Bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{Bmatrix},$$

$$\sigma_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Bmatrix},$$

$$\rho_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{Bmatrix},$$

$$\rho_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Bmatrix}.$$

Следует заметить, что матрицы  $\rho$  и  $\sigma$  являются эрмитовыми, так что матрицы  $\alpha$  также эрмитовы.

Соответственно четырем строкам и столбцам волновая функция  $\psi$  должна содержать переменную, принимающую четыре значения; тогда можно умножать на нее матрицу. Иначе говоря, можно считать волновую функцию четырехкомпонентной, причем каждая компонента есть функция только от четырех величин  $x$ . Мы видели в § 37, что спин электрона требует двухкомпонентной волновой функции. Тот факт, что наша теория дает четырехкомпонентную функцию, вызван тем, что волновое уравнение (7) имеет вдвое больше решений, чем должно быть, и половина из них соответствует состояниям с отрицательной энергией.



Так как величины  $H$  и  $p_1$  постоянны, то из первого уравнения (25) вытекает

$$i\hbar\ddot{\alpha}_1 = 2\dot{\alpha}_1 H. \quad (26)$$

Это дифференциальное уравнение относительно  $\dot{\alpha}_1$  может быть сразу проинтегрировано; результат имеет вид

$$\dot{\alpha}_1 = \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar}, \quad (27)$$

где  $\dot{\alpha}_1^0$  — постоянная, равная значению  $\dot{\alpha}_1$  при  $t = 0$ . Множитель  $e^{-2iHt/\hbar}$  должен в (27) стоять справа от множителя  $\dot{\alpha}_1^0$ , поскольку в (26)  $H$  стоит справа от  $\dot{\alpha}_1$ . Второе из уравнений (25) дает аналогичным образом результат

$$\dot{\alpha}_1 = e^{2iHt/\hbar} \dot{\alpha}_1^0.$$

Теперь можно легко завершить интегрирование уравнения движения для  $x_1$ . Из (27) и первого из уравнений (25) имеем

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} i\hbar \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-1} + c p_1 H^{-1} \quad (28)$$

и, следовательно, интеграл по времени от уравнения (24) есть

$$x_1 = -\frac{1}{4} c\hbar^2 \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-2} + c^2 p_1 H^{-1} t + a_1 \quad (29)$$

где  $a_1$  — постоянная.

Из (28) видно, что проекция скорости на ось  $x_1$ , равная  $c\alpha_1$ , состоит из двух частей: постоянной части  $c^2 p_1 H^{-1}$ , связанной с импульсом классической релятивистской формулы, и осциллирующей части

$$\frac{1}{2} i c \hbar \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-1},$$

частота которой равна  $2H/\hbar$  и велика, поскольку эта величина по меньшей мере равна  $2mc^2/\hbar$ . Только постоянная часть может наблюдаться в действительном измерении скорости, поскольку такое измерение дает среднюю скорость за интервал времени, значительно превышающий  $\hbar/2mc^2$ . Осциллирующая часть и приводит к тому, что мгновенное  $\dot{x}_1$  будет иметь собственные значения  $\pm c$ .

Осциллирующая часть координаты  $x_1$  мала. В самом деле, согласно (29) она равна

$$-\frac{1}{4} c\hbar^2 \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-2} = \frac{1}{2} i c \hbar (\alpha_1 - c p_1 H^{-1}) H^{-1},$$

что имеет порядок величины  $\hbar/mc$ , так как величина  $\alpha_1 - c p_1 H^{-1}$  порядка единицы.

## § 70. Существование спина

В § 67 мы видели, что правильное волновое уравнение электрона в отсутствие электромагнитного поля, а именно уравнение (7) или (10), эквивалентно волновому уравнению (6), которое подсказано аналогией с классической теорией. Эта эквивалентность нарушается если имеется поле. Из аналогии с классической теорией можно было бы ожидать, что уравнение в этом случае будет иметь вид

$$\left\{ \left( p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - m^2 c^2 \right\} \psi = 0. \quad (30)$$

Здесь оператор в точности соответствует классической релятивистской функции Гамильтона.

С другой стороны, можно умножить уравнение (11) слева на некоторый множитель, чтобы добиться как можно более близкого сходства с (30), именно, на множитель

$$p_0 + \frac{e}{c} A_0 + \rho_1 \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) + \rho_3 mc.$$

Мы получим тогда

$$\begin{aligned} & \left\{ \left( p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 - m^2 c^2 - \right. \\ & - \rho_1 \left[ \left( p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) - \right. \\ & \left. \left. - \left( \sigma, \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \left( p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) \right] \right\} \psi = 0. \quad (31) \end{aligned}$$

Воспользуемся теперь общей формулой, справедливой для двух трехмерных векторов  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{C}$ , коммутирующих с  $\sigma$ :

$$(\sigma, \mathbf{B})(\sigma, \mathbf{C}) = \sum_{123} \{ \sigma_1^2 B_1 C_1 + \sigma_1 \sigma_2 B_1 C_2 + \sigma_2 \sigma_1 B_2 C_1 \},$$

где сумма берется по циклической перестановке индексов 1, 2, 3; эту формулу можно также записать в виде

$$\begin{aligned} (\sigma, \mathbf{B})(\sigma, \mathbf{C}) &= (\mathbf{B}, \mathbf{C}) + i \sum_{123} \sigma_3 (B_1 C_2 - B_2 C_1) = \\ &= (\mathbf{B}, \mathbf{C}) + i(\sigma, [\mathbf{B} \times \mathbf{C}]). \quad (32) \end{aligned}$$

Полагая  $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$  и принимая во внимание равенство

$$\begin{aligned} \left[ \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] &= \frac{e}{c} \{ [\mathbf{p} \times \mathbf{A}] + [\mathbf{A} \times \mathbf{p}] \} = \\ &= -i\hbar \frac{e}{c} \text{rot } \mathbf{A} = -i\hbar \frac{e}{c} \mathcal{H}, \end{aligned}$$

где  $\mathcal{H}$  — магнитное поле, мы получим

$$\left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right)^2 = \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + \frac{\hbar e}{c} (\sigma, \mathcal{H}). \quad (33)$$

Имеем также

$$\begin{aligned} \left(p_0 + \frac{e}{c} A_0\right) \left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right) - \left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right) \left(p_0 + \frac{e}{c} A_0\right) &= \\ &= \frac{e}{c} (\sigma, (p_0 \mathbf{A} - \mathbf{A} p_0 + A_0 \mathbf{p} - \mathbf{p} A_0)) = \\ &= \frac{i\hbar e}{c} \left(\sigma, \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \text{grad } A_0\right)\right) = -i \frac{\hbar e}{c} (\sigma, \mathcal{E}), \end{aligned}$$

где  $\mathcal{E}$  — электрическое поле. Следовательно, уравнение (31) принимает вид

$$\left\{ \left(p_0 + \frac{e}{c} A_0\right)^2 - \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 - m^2 c^2 - \frac{\hbar e}{c} (\sigma, \mathcal{H}) + \right. \\ \left. + i\rho_1 \frac{\hbar e}{c} (\sigma, \mathcal{E}) \right\} \psi = 0. \quad (34)$$

Это уравнение отличается от (30) двумя добавочными членами в операторе. Эти добавочные члены вызывают некоторые новые физические эффекты, но поскольку они не являются вещественными, то сами по себе они не приводят сразу к физической интерпретации.

Для того чтобы понять, какие физические свойства отображаются различием между (34) и (30), лучше проводить рассмотрение в гейзенберговской картине, которая всегда является более удобной для сопоставления классической и квантовой механики. Гейзенберговские уравнения движения определяются оператором Гамильтона

$$H = -e A_0 + c\rho_1 \left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right) + \rho_3 m c^2, \quad (35)$$

являющимся обобщением (23) на случай присутствия поля. Из уравнения (35) при учете (33) получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{H}{c} + \frac{e}{c} A_0\right)^2 &= \left\{ \rho_1 \left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right) + \rho_3 m c \right\}^2 = \\ &= \left(\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right)^2 + m^2 c^2 = \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 + m^2 c^2 + \frac{\hbar e}{c} (\sigma, \mathcal{H}). \end{aligned} \quad (36)$$

Мы имеем здесь вещественную часть добавочных членов в уравнении (34), и они появляются без чисто-мнимой части.

Можно ожидать, что для медленно движущегося электрона (т. е. при малом импульсе) гейзенберговские уравнения движения будут определяться оператором Гамильтона вида  $mc^2 + H_1$ , где  $H_1$  мало по сравнению с  $mc^2$ . Полагая в формуле (36)  $H = mc^2 + H_1$ , пренебрегая величиной  $H_1^2$  и другими членами, содержащими  $c^{-2}$ , и разделив на  $2m$ , получим

$$H_1 + eA_0 = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{c}{e} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{\hbar e}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}, \mathcal{H}). \quad (37)$$

Оператор Гамильтона  $H_1$ , определяемый формулой (37), совпадает по виду с классической функцией Гамильтона для медленного электрона, за исключением члена

$$\frac{\hbar e}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}, \mathcal{H}).$$

Этот член можно рассматривать как дополнительную потенциальную энергию, которую по квантовой теории имеет медленный электрон. Добавочный член можно приписать наличию у электрона магнитного момента

$$- \frac{\hbar e}{2mc} \boldsymbol{\sigma}.$$

Это как раз тот магнитный момент, который был предположен в §§ 41 и 47 в связи с рассмотрением эффекта Зеемана и который согласуется с опытом.

Спиновый момент количества движения не дает никакой потенциальной энергии, и поэтому не проявляется в предыдущих расчетах. Простейший способ показать существование спинового момента количества движения состоит в рассмотрении движения свободного электрона в центральном силовом поле и в определении интеграла момента количества движения. Это означает, что нужно взять оператор Гамильтона (23) или же оператор Гамильтона (35), в котором  $\mathbf{A} = 0$  и  $A_0$  есть функция от радиуса  $r$ , т. е. положить

$$H = -eA_0(r) + c\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + \rho_3 mc^2, \quad (38)$$

и затем получить уравнения движения Гейзенберга для момента количества движения. С тем или другим оператором Гамильтона мы находим с помощью перестановочных соотношений § 35 для скорости изменения проекции орбитального момента количества движения на ось  $x_1$ , т. е. для

величины  $m_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2$ , следующее выражение:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{m}_1 &= m_1 H - H m_1 = c p_1 \{m_1(\sigma, \mathbf{p}) - (\sigma, \mathbf{p}) m_1\} = \\ &= c p_1 (\sigma, (m_1 \mathbf{p} - \mathbf{p} m_1)) = i\hbar c p_1 \{\sigma_2 p_3 - \sigma_3 p_2\}. \end{aligned}$$

Таким образом,  $\dot{m}_1 \neq 0$  и орбитальный момент количества движения не является интегралом движения. Этот результат можно было предвидеть на основании проинтегрированного уравнения движения (29), так как в нем обнаруживается осциллирующая часть движения, которая приводит к осциллирующему члену в моменте количества движения.

Далее, имеем с помощью уравнений (51) § 37

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\sigma}_1 &= \sigma_1 H - H \sigma_1 = c p_1 \{\sigma_1(\sigma, \mathbf{p}) - (\sigma, \mathbf{p}) \sigma_1\} = \\ &= c p_1 ((\sigma_1 \sigma - \sigma \sigma_1), \mathbf{p}) = 2i c p_1 \{\sigma_2 p_3 - \sigma_3 p_2\}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\dot{m}_1 + \frac{1}{2} \hbar \dot{\sigma}_1 = 0,$$

так что вектор  $\mathbf{m} + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}$  является интегралом движения. Этот результат можно толковать как *существование у электронов спинового момента количества движения*  $\frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}$ , который нужно прибавить к орбитальному моменту  $\mathbf{m}$ , чтобы получить интеграл движения. Спиновый момент количества движения мог бы быть получен и путем рассмотрения операторов вращения для состояний со спиновой степенью свободы в соответствии с общим методом § 35.

Один и тот же вектор  $\boldsymbol{\sigma}$  определяет собой направления как спинового магнитного момента, так и спинового момента количества движения. Если электрон в определенном спиновом состоянии имеет в данном направлении спиновый момент количества движения  $\frac{1}{2} \hbar$ , то он будет иметь в том же направлении магнитный момент  $-\frac{e\hbar}{2mc}$ .

Мы получили величину  $\frac{1}{2} \hbar$  для спина электрона из соображений, связанных с общими принципами квантовой теории и теории относительности. Можно было бы применить те же соображения к другим видам элементарных частиц; мы получили бы тот же результат, а именно, что спиновый момент количества движения равен половине кванта. Это подходит для протона и нейтрона. Но есть некоторые типы

элементарных частиц (например, фотоны и некоторые виды мезонов) спин которых, как известно из опыта, отличается от  $\frac{1}{2} \hbar$ , так что мы имеем здесь противоречие между нашей теорией и экспериментом.

Ответ следует искать в сделанном нами неявном допущении. Наши соображения имеют силу только в предположении, что положение частицы есть наблюдаемая. Если это допущение справедливо, то частица должна иметь спин, равный половине кванта. Для тех же частиц, которые имеют другой спин, это предположение должно быть ложным; всякие динамические переменные  $x_1, x_2, x_3$ , которые можно ввести для описания положения частицы, не могут быть наблюдаемыми в смысле общей теории. Для таких частиц не существует настоящего шредингеровского представления. Если и окажется возможным ввести квазиволновую функцию, содержащую динамические переменные  $x_1, x_2, x_3$ , то она не будет допускать правильной физической интерпретации волновой функции, состоящей в том, что квадрат ее модуля дает плотность вероятности. Для таких частиц все же имеется импульсное представление, и для практических целей оно достаточно.

### § 71. Переход к сферическим координатам

Для дальнейшего изучения движения электрона в центральном силовом поле с оператором Гамильтона (38) целесообразно перейти к сферическим координатам, как было сделано в § 38 в нерелятивистском случае. Можно, как и прежде, ввести переменные  $r$  и  $p_r$ , но вместо  $k$  — величины орбитального момента  $m$ , который уже не является интегралом движения, нужно теперь пользоваться величиной полного момента количества движения  $M = m + \frac{1}{2} \hbar \sigma$ . Положим

$$j^2 \hbar^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 + \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (39)$$

Собственные значения  $m_3$  являются целыми кратными  $\hbar$ , а собственные значения  $\frac{1}{2} \hbar \sigma_3$  равны  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Следовательно, собственные значения  $M_3$  должны быть нечетными кратными  $\hbar$ . Из теории § 36 следует, что собственные значения  $|j|$  должны быть положительными целыми числами.

Если в формуле (32) положить  $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{m}$ , то получится

$$(\sigma, \mathbf{m})^2 = \mathbf{m}^2 + i(\sigma, [\mathbf{m} \times \mathbf{m}]) = \mathbf{m}^2 - \hbar(\sigma, \mathbf{m}) =$$

$$= \left(\mathbf{m} + \frac{1}{2}\hbar\sigma\right)^2 - 2\hbar(\sigma, \mathbf{m}) - \frac{3}{4}\hbar^2.$$

Следовательно, имеем

$$\{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\}^2 = \mathbf{M}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2.$$

Итак  $(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar$  является величиной, квадрат которой равен  $\mathbf{M}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2$ , и мы могли бы, в согласии с уравнением (39), положить  $j\hbar$  равным величине  $(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar$ . Это, однако, не является наиболее целесообразным определением, поскольку было бы желательным иметь в качестве  $j$  интеграл движения, а выражение  $(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar$  не является таковым. Из (32) следуют равенства

$$(\sigma, \mathbf{m})(\sigma, \mathbf{p}) = i(\sigma, [\mathbf{m} \times \mathbf{p}])$$

и

$$(\sigma, \mathbf{p})(\sigma, \mathbf{m}) = i(\sigma, [\mathbf{p} \times \mathbf{m}]),$$

так что имеет место соотношение

$$(\sigma, \mathbf{m})(\sigma, \mathbf{p}) + (\sigma, \mathbf{p})(\sigma, \mathbf{m}) =$$

$$= i \sum_{123} \sigma_1 \{m_2 p_3 - m_3 p_2 + p_2 m_3 - p_3 m_2\} = i \sum_{123} \sigma_1 2i\hbar p_1 =$$

$$= -2\hbar(\sigma, \mathbf{p})$$

или, иначе,

$$\{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\}(\sigma, \mathbf{p}) + (\sigma, \mathbf{p})\{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\} = 0.$$

Следовательно,  $(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar$  антикоммутирует с одним из членов в выражении (38) для  $H$ , именно, с членом  $\sigma p_1(\sigma, \mathbf{p})$  и коммутирует с двумя другими. Отсюда следует, что  $\rho_3 \{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\}$  коммутирует со всеми тремя членами в  $H$  и является интегралом движения. Но квадрат  $\rho_3 \{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\}$  есть также  $\mathbf{M}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2$ . Поэтому мы можем положить

$$j\hbar = \rho_3 \{(\sigma, \mathbf{m}) + \hbar\}, \quad (40)$$

что дает нам удобное, рациональное определение  $j$ , согласующееся с (39), притом такое, что величина  $j$  становится интегралом движения. Собственными значениями этого  $j$

являются все положительные и отрицательные целые числа, исключая значение нуль.

Пользуясь еще раз соотношением (32) и учитывая равенства (40) и (58) § 38, получим

$$(\sigma, x)(\sigma, p) = (x, p) + i(\sigma, m) = r p_r + i \rho_3 j \hbar - i \hbar. \quad (41)$$

Введем линейный оператор  $\epsilon$ , определив его выражением

$$r \epsilon = \rho_1(\sigma, x). \quad (42)$$

Так как переменная  $r$  коммутирует с оператором  $\rho_1$  и  $(\sigma, x)$ , то она должна коммутировать также и с  $\epsilon$ . Поэтому имеем

$$r^2 \epsilon^2 = [\rho_1, (\sigma, x)]^2 = (\sigma, x)^2 = x^2 = r^2$$

или

$$\epsilon^2 = 1.$$

Далее, оператор  $\rho_1(\sigma, p)$  коммутирует с оператором  $j$ , а так как между величинами  $x$  и  $p$  имеется симметрия по отношению к моменту количества движения, то оператор  $\rho_1(\sigma, x)$  должен тоже коммутировать с оператором  $j$ . Следовательно, операторы  $\epsilon$  и  $j$  коммутируют. Кроме того, оператор  $\epsilon$  должен коммутировать с  $p_r$ , так как в силу соотношения

$$(\sigma, x)(x, p) - (x, p)(\sigma, x) = (\sigma, (x(x, p) - (x, p)x)) = i \hbar (\sigma, x),$$

мы имеем

$$r \epsilon r p_r - r p_r r \epsilon = i \hbar r \epsilon,$$

откуда следует

$$r^2 \epsilon p_r - r^2 p_r \epsilon = 0.$$

Из (41) и (42) получаем

$$r \epsilon \rho_1(\sigma, p) = r p_r + i \rho_3 j \hbar - i \hbar,$$

или

$$\rho_1(\sigma, p) = \epsilon \left( p_r - \frac{i \hbar}{r} \right) + i \epsilon \rho_3 \frac{j \hbar}{r}.$$

Таким образом, выражение (38) принимает вид

$$\frac{H}{c} = -\frac{e}{c} A_0 + \epsilon \left( p_r - \frac{i \hbar}{r} \right) + i \epsilon \rho_3 \frac{j \hbar}{r} + \rho_3 m c$$

и представляет собой оператор Гамильтона, выраженный в сферических координатах. Следует отметить, что операторы  $\epsilon$  и  $\rho_3$  коммутируют со всеми другими переменными,



встречающимися в операторе Гамильтона, и антикоммутируют друг с другом. Это значит, что можно взять представление, в котором операторы  $\varepsilon$  и  $\rho_3$  выражаются матрицами

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (43)$$

Если переменная  $r$  также диагональна в рассматриваемом представлении, то представитель  $\langle r' | \rho_3 | \rangle$  вектора состояния будет иметь две компоненты, скажем  $\langle r', 1 | \rangle = \psi_a(r')$  и  $\langle r', -1 | \rangle = \psi_b(r')$ , относящиеся к двум строкам и столбцам матриц (43).

## § 72. Тонкая структура уровней энергии водорода

Рассмотрим теперь случай атома водорода, для которого  $A_0 = \frac{e}{r}$ , и найдем его уровни энергии, определяемые собственными значениями  $H'$  оператора  $H$ . В рассмотренном выше представлении, в котором  $\varepsilon$  и  $\rho$  выражаются матрицами (43), уравнение  $(H' - H) | \rangle = 0$  принимает вид

$$\begin{aligned} \left( \frac{H'}{c} + \frac{e^2}{cr} \right) \psi_a + \hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi_b + \frac{i\hbar}{r} \psi_b - mc\psi_a &= 0, \\ \left( \frac{H'}{c} - \frac{e^2}{cr} \right) \psi_b - \hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi_a + \frac{j\hbar}{r} \psi_a + mc\psi_b &= 0. \end{aligned}$$

Если положить

$$\frac{\hbar}{mc - \frac{H'}{c}} = a_1, \quad \frac{\hbar}{mc + \frac{H'}{c}} = a_2, \quad (44)$$

то уравнения приводятся к следующим:

$$\left. \begin{aligned} \left( \frac{1}{a_1} - \frac{\alpha}{r} \right) \psi_a - \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{j+1}{r} \right) \psi_b &= 0, \\ \left( \frac{1}{a_2} + \frac{\alpha}{r} \right) \psi_b - \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{j-1}{r} \right) \psi_a &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

В них величина  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$  является малым числом. Мы будем решать эти уравнения методом, аналогичным использованному в (73) § 39.

Положим

$$\psi_a = r^{-1} e^{-r/af}, \quad \psi_b = r^{-1} e^{-r/ag}, \quad (46)$$

где  $f$  и  $g$  — две новые функции от  $r$  и где введено обозначение

$$a = (a_1 a_2)^{1/2} = \hbar \left( m^2 c^2 - \frac{H'^2}{c^2} \right)^{-1/2}. \quad (47)$$

Уравнения (45) принимают вид

$$\left. \begin{aligned} \left( \frac{1}{a_1} - \frac{\alpha}{r} \right) f - \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{a} + \frac{j}{r} \right) g &= 0, \\ \left( \frac{1}{a_2} + \frac{\alpha}{r} \right) g - \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{a} - \frac{j}{r} \right) f &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

Будем искать решение в виде степенных рядов для  $f$  и  $g$

$$f = \sum_s c_s r^s, \quad g = \sum_s c'_s r^s, \quad (49)$$

где последовательные значения  $s$  отличаются на единицу, хотя сами эти числа могут и не быть целыми. Подставив эти выражения для  $f$  и  $g$  в (48) и собирая коэффициенты при  $r^{s-1}$ , мы получим

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{a_1} c_{s-1} - \alpha c_s - (s+j) c'_s + \frac{1}{a} c'_{s-1} &= 0, \\ \frac{1}{a_2} c'_{s-1} + \alpha c'_s - (s-j) c_s + \frac{1}{a} c_{s-1} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

Умножая первое из этих уравнений на  $a_1$ , второе на  $a_2$  и вычитая, мы исключим как  $c_{s-1}$ , так и  $c'_{s-1}$ , потому что из (47) вытекает равенство  $\frac{a}{a_1} = \frac{a_2}{a}$ . Остается, следовательно,

$$[\alpha a - a_2 (s-j)] c_s + [a_2 \alpha + a (s+j)] c'_s = 0. \quad (51)$$

Это соотношение показывает связь между штрихованными и нештрихованными коэффициентами  $c$ .

Краевые условия при  $r = 0$  требуют, чтобы  $r\psi_a$  и  $r\psi_b$  стремились к нулю, когда  $r$  стремится к нулю так, что из (46) следует  $f$  и  $g \rightarrow 0$ , когда  $r \rightarrow 0$ . Таким образом, ряд (49) должен обрываться со стороны малых  $s$ . Если  $s_0$  означает наименьшее значение  $s$ , при котором коэффициенты  $c_s$  и  $c'_s$  не обращаются оба в нуль, то, полагая  $s = s_0$  и  $c_{s_0-1} = c'_{s_0-1} = 0$ , мы получаем из (50)

$$\left. \begin{aligned} \alpha c_{s_0} + (s_0 + j) c'_{s_0} &= 0, \\ \alpha c'_{s_0} - (s_0 - j) c_{s_0} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

откуда следует равенство

$$\alpha^2 = -s_0^2 + j^2.$$

Так как краевое условие требует, чтобы минимальное значение  $s$  было больше нуля, мы должны положить

$$s_0 = +\sqrt{(j^2 - \alpha^2)}.$$

Для исследования сходимости рядов (49) мы определим отношение  $c_s/c_{s-1}$  для больших  $s$ . Из уравнения (51) и второго уравнения (52) имеем приближенно при больших  $s$

$$a_2 c_s = a c'_s$$

и

$$s c_s = \frac{1}{a} c_{s-1} + \frac{1}{a_2} c'_{s-1};$$

отсюда

$$\frac{c_s}{c_{s-1}} = \frac{2}{as}.$$

Следовательно, ряд (49) будет сходиться подобно ряду

$$\sum_s \frac{1}{s!} \left( \frac{2r}{a} \right)^s,$$

равному  $e^{2r/a}$ . Этот результат аналогичен результату, полученному в § 39, и, так же как и там, дает возможность заключить, что в том случае, когда  $H'$  чисто-мнимое, т. е. когда, согласно (47),  $H' > mc^2$ , дозволены все значения  $a$ . Если же  $H' < mc^2$ , то, выбирая  $a$  положительным, мы находим, что дозволены только значения  $H'$ , для которых ряды (49) обрываются со стороны больших  $s$ .

Если ряды (49) обрываются на членах  $c_s$  и  $c'_s$ , так что  $c_{s+1} = c'_{s+1} = 0$ , то, заменяя в (50)  $s + 1$  на  $s$ , получаем

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{a_1} c_s + \frac{1}{a} c'_s &= 0, \\ \frac{1}{a_2} c'_s + \frac{1}{a} c_s &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (53)$$

В силу (47) эти два уравнения эквивалентны. В соединении с (51) они дают

$$a_1 [a\alpha - a_2 (s - j)] = a [a_2 \alpha + a (s + j)].$$

Это соотношение с помощью (44) приводится к следующему:

$$2a_1 a_2 s = a (a_1 - a_2) \alpha.$$

Отсюда следует

$$\frac{s}{a} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{a_2} - \frac{1}{a_1} \right) \alpha = \frac{H'}{c\hbar} \alpha.$$

Возводя в квадрат и пользуясь (47), мы получим

$$s^2 \left( m^2 c^2 - \frac{H'^2}{c^2} \right) = \alpha^2 \frac{H'^2}{c^2}.$$

Следовательно,

$$\frac{H'}{mc^2} = \left( 1 + \frac{\alpha^2}{s^2} \right)^{-1/2}.$$

Здесь величина  $s$ , представляющая значок при последнем члене в ряду, должна быть больше, чем  $s_0$  на некоторое неотрицательное целое число. Обозначая это число через  $n$ , получим

$$s = n + \sqrt{j^2 - \alpha^2}$$

и, следовательно,

$$\frac{H'}{mc^2} = \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{[n + \sqrt{j^2 - \alpha^2}]^2} \right\}^{-1/2}. \quad (54)$$

Эта формула дает дискретные уровни энергии спектра водорода. Она была впервые получена Зоммерфельдом на основе боровской теории орбит. В формуле (54) содержатся два квантовых числа:  $n$  и  $j$ , но в силу малости  $\alpha^2$  энергия зависит почти исключительно от  $n + |j|$ . Величины  $n$  и  $|j|$ , дающие одно и то же  $n + |j|$ , приводят к системе уровней энергии, лежащих близко друг к другу. Если вычесть из них постоянную величину, то эти уровни лежат близко к уровню энергии, определяемому нерелятивистской формулой (80) § 40 с  $s = n + |j|$ .

Мы использовали уравнения (53), комбинируя их с (51), при этом, однако, уравнения (53) использовались не полностью, так как не было учтено, что коэффициенты  $c_s$  и  $c'_s$  в (51) могут оба обратиться в нуль. В этом случае мы получаем, умножая первый коэффициент на  $a_1$ , второй на  $a$  и складывая,

$$a(a_1 + a_2)\alpha + 2a_1a_2j = 0.$$

Итак,  $j$  должно быть в этом случае отрицательно. С помощью (44) и (47) получаем далее

$$-\frac{2j}{\alpha} = \frac{a}{a_2} + \frac{a}{a_1} = \frac{2mca}{\hbar} = \frac{2mc}{\left( m^2 c^2 - \frac{H'^2}{c^2} \right)^{1/2}},$$

откуда

$$\frac{H'^2}{m^2 c^4} = 1 - \frac{\alpha^2}{j^2}.$$

Так как величина  $H'$  должна быть положительна, то

$$\frac{H'}{mc^2} = \frac{\sqrt{j^2 - \alpha^2}}{|j|}. \quad (55)$$

Это совпадает со значением  $H'$  из (54) при  $n = 0$ . Случай  $n = 0$ ,  $j < 0$  нуждается, таким образом, в дальнейшем исследовании, а именно, в выяснении вопроса о том, удовлетворены ли тогда условия (53).

При  $n = 0$  наибольшее значение  $s$  совпадает с наименьшим; поэтому уравнения (53), в которых вместо  $s$  подставлено  $s_0$ , должны быть в согласии с (52). Уравнение (55) дает в силу (44) и (47)

$$\frac{1}{a_1} = \frac{mc}{\hbar} \left( 1 - \frac{\sqrt{j^2 - \alpha^2}}{|j|} \right), \quad \frac{1}{a} = \frac{mc}{\hbar} \frac{\alpha}{|j|},$$

так что первое из уравнений (53) с  $s_0$  вместо  $s$  приводится к виду

$$c_{s_0} \{ |j| - \sqrt{j^2 - \alpha^2} \} + c'_{s_0} \alpha = 0.$$

Это согласуется со вторым из уравнений (52), только если  $j$  положительно; таким образом, случай  $n = 0$ ,  $j < 0$  к решению не приводит. Мы можем заключить, что для  $n = 0$   $j$  должно быть положительным целым числом, тогда как при других значениях  $n$  для числа  $j$  допустимы все ненулевые целые значения.

### § 73. Теория позитронов

В § 67 было упомянуто, что волновое уравнение для электрона допускает вдвое больше решений, чем следовало бы, причем половина из них относится к состояниям с отрицательными значениями кинетической энергии  $cp_0 + eA_0$ . Эта трудность появилась сразу же, как только мы перешли от уравнения (5) к уравнению (6), и она свойственна любой релятивистской теории. Она также встречается в классической релятивистской теории, но там она не является серьезной. Вследствие непрерывности изменения всех классических динамических переменных, если кинетическая энергия  $cp_0 + eA_0$  вначале положительна (для этого она должна быть

большей или равной  $mc^2$ ), то она не может потом стать отрицательной (для этого она должна была бы стать меньшей или равной  $-mc^2$ ). В квантовой теории, однако, возможны скачкообразные переходы, так что если электрон первоначально находился в состоянии с положительной кинетической энергией, то он может перейти в состояние с отрицательной кинетической энергией. Поэтому становится невозможным игнорировать состояния с отрицательными энергиями, как это можно делать в классической теории.

Рассмотрим несколько ближе те решения уравнения

$$\left\{ \left( p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) - \alpha_1 \left( p_1 + \frac{e}{c} A_1 \right) - \right. \\ \left. - \alpha_2 \left( p_2 + \frac{e}{c} A_2 \right) - \alpha_3 \left( p_3 + \frac{e}{c} A_3 \right) - \alpha_m mc \right\} \psi = 0, \quad (56)$$

которые соответствуют отрицательной энергии. Для этой цели удобно воспользоваться таким представлением матриц  $\alpha$ , в котором все элементы матриц  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  и  $\alpha_3$  вещественны, а все элементы матрицы  $\alpha_m$  чисто-мнимы или нули. Такое представление может быть получено, например, из представления § 67 путем перестановки в (9) выражений для  $\alpha_2$  и  $\alpha_m$ . Если записать уравнение (56) как матричное уравнение в этом представлении и заменить везде  $i$  на  $-i$ , то мы получим

$$\left\{ \left( -p_0 + \frac{e}{c} A_0 \right) - \alpha_1 \left( -p_1 + \frac{e}{c} A_1 \right) - \right. \\ \left. - \alpha_2 \left( -p_2 + \frac{e}{c} A_2 \right) - \alpha_3 \left( -p_3 + \frac{e}{c} A_3 \right) + \alpha_m mc \right\} \bar{\psi} = 0. \quad (57)$$

Здесь учтено, что величины (4) содержат  $i$ . Таким образом, каждому решению  $\psi$  уравнения (56) соответствует комплексно-сопряженное  $\bar{\psi}$ , являющееся решением уравнения (57). Далее, если решение  $\psi$  уравнения (56) принадлежит отрицательному значению  $cp_0 + eA_0$ , то соответствующее решение  $\bar{\psi}$  уравнения (57) принадлежит положительному значению  $cp_0 - eA_0$ . Но оператор в (57) может быть получен из оператора в (56) путем замены  $e$  на  $-e$ . Отсюда следует, что каждое решение с отрицательной энергией уравнения (56) является комплексно-сопряженным к решению с положительной энергией того волнового уравнения, которое получается из (56) заменой  $e$  на  $-e$ . Последнее же решение описывает электрон с зарядом  $+e$  (вместо  $-e$ ,

как было до сих пор), движущийся в электромагнитном поле. Итак, нежелательные решения (56) связаны с движением электрона с зарядом  $+e$ . (При наличии произвольного электромагнитного поля невозможно, разумеется, строго разделить решения (56) на те, которые относятся к положительным значениям  $cr_0 + eA_0$ , и те, которые относятся к отрицательным значениям. В самом деле, такое разделение означало бы, что переходы от одного вида к другому невозможны. Поэтому вышеизложенные соображения являются приближенными, применимыми к случаю, когда такое разделение приблизительно возможно.)

Таким образом, мы приходим к выводу, что соответствующие отрицательные энергии решения уравнения (56) относятся к движению нового сорта частиц, имеющих массу электрона и противоположный заряд. Такие частицы наблюдались экспериментально и названы позитронами. Мы не можем, однако, просто утверждать, что решения с отрицательной энергией представляют позитроны; это сделало бы неправильными все динамические соотношения. Например, определенно неверно, что позитрон имеет отрицательную кинетическую энергию. Мы должны поэтому строить теорию позитрона на несколько ином основании. Мы введем предположение, что *почти все состояния с отрицательной энергией заняты*, причем в соответствии с принципом Паули в каждом состоянии имеется один электрон. Незанятое состояние с отрицательной энергией будет выглядеть, как нечто с положительной энергией, так как для того, чтобы уничтожить его, т. е. заполнить, мы должны добавить к нему электрон с отрицательной энергией. Мы предположим, что *незанятые состояния с отрицательной энергией являются позитронами*.

Эти предположения требуют распределения электронов с бесконечной плотностью во всем мире. Абсолютный вакуум есть область, в которой все состояния с положительной энергией свободны, а все состояния с отрицательной энергией заняты. В абсолютном вакууме должно быть, очевидно, справедливо уравнение Максвелла

$$\operatorname{div} \mathfrak{E} = 0.$$

Это значит, что бесконечное распределение электронов с отрицательной энергией не влияет на электрическое поле. Только отклонение от распределения в вакууме будет влиять

на электрическую плотность  $j_0$  в уравнении Максвелла

$$\operatorname{div} \mathfrak{E} = 4\pi j_0. \quad (58)$$

Каждое занятое состояние с положительной энергией будет вносить вклад  $-e$ , а каждое незанятое состояние с отрицательной энергией вклад  $+e$ .

Благодаря принципу Паули электрон с положительной энергией удерживается обычно от перехода в состояние с отрицательной энергией. Однако возможен еще переход такого электрона в *незанятое* состояние с отрицательной энергией. В этом случае мы имели бы одновременное исчезновение электрона и позитрона с испусканием энергии в форме излучения. Обратный процесс состоял бы в рождении позитрона и электрона из электромагнитного излучения.

Из симметрии между занятыми и свободными состояниями фермионов, которая обсуждалась в конце § 65, следует, что данная теория существенно симметрична относительно позитронов и электронов. Мы имели бы эквивалентную теорию, если предположили бы, что основными частицами являются позитроны, описываемые волновым уравнением (11), в котором вместо  $-e$  стоит  $e$ , и предположили бы затем, что все состояния позитронов с отрицательной энергией заняты. Тогда дырка в распределении позитронов с отрицательной энергией толковалась бы как электрон. Такую теорию можно было бы развить в согласии с гипотезой, что все физические законы симметричны относительно электронов и позитронов \*).

---

\*) Изложенная в § 73 теория была развита Дираком еще до открытия позитрона и по существу представляла собой предсказание существования античастиц. Это — один из самых сильных и нетривиальных результатов синтеза квантовой механики и теории относительности. В ходе дальнейшего развития физики элементарных частиц было установлено, что античастицы существуют как у фермионов, так и у бозонов. Для объяснения существования античастиц у бозонов теория, изложенная здесь, недостаточна, так как для бозонов принцип Паули не ограничивает числа частиц в одном состоянии. (Прим. перев.)



## ГЛАВА XII

### КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

#### § 74. Электромагнитное поле в отсутствие вещества

Теория излучения, развитая в гл. X, содержала некоторые пренебрежения в трактовке взаимодействия излучения с веществом. Задача настоящей главы состоит в том, чтобы устранить эти пренебрежения и получить, насколько это возможно, точную теорию электромагнитного поля, взаимодействующего с веществом, причем вещество считается состоящим только из электронов и позитронов. О других формах вещества — протонах, нейтронах и др. известно слишком мало, для того чтобы пытаться в настоящее время построить точную теорию их взаимодействия с электромагнитным полем. Точная же теория электронов и позитронов существует в той форме, как она изложена в предыдущей главе. Эту теорию и можно использовать для построения точной теории взаимодействия электромагнитного поля с этим видом вещества. Теория должна позволить вывести кулоновское взаимодействие электронов и позитронов друг с другом и их взаимодействие с электромагнитным излучением и должна, разумеется, согласоваться с частной теорией относительности. Для краткости мы в этой главе будем считать  $c = 1$ .

Прежде всего следует рассмотреть электромагнитное поле без взаимодействия с веществом. В § 63 уже рассматривалось поле излучения без взаимодействия с веществом. Для описания поля были введены динамические переменные и для них были установлены перестановочные соотношения; кроме того, был найден оператор Гамильтона, который давал правильную зависимость от времени этих динамических переменных. При этом не было сделано никаких пренебрежений. Полученная теория могла бы поэтому рассматриваться как удовлетворительная точная теория излучения, не взаи-

модействующего с веществом, если бы не одно обстоятельство — предположение о том, что скалярный потенциал равен нулю. Это обстоятельство нарушает релятивистскую форму теории и делает ее неподходящей в качестве исходного пункта для развития точной теории электромагнитного поля, взаимодействующего с веществом.

Мы должны, следовательно, обобщить построение § 63, сохранив потенциал  $A_0$  и рассматривая его наравне с другими потенциалами  $A_1, A_2, A_3$ . Следовательно, будет четыре  $A_\mu$ , и они будут удовлетворять уравнению, являющемуся обобщением (62) § 63, а именно:

$$\square A_\mu = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} = 0. \quad (2)$$

Мы не будем пока обращать внимание на второе из этих уравнений и рассмотрим только первое.

Из уравнения (1) следует, что каждая компонента  $A_\mu$  может быть разложена на волны, распространяющиеся со скоростью света. В соответствии с уравнением (63) § 63 мы имеем поэтому

$$A_\mu(x) = \int (A_{\mu k} e^{ik \cdot x} + \bar{A}_{\mu k} e^{-ik \cdot x}) d^3k, \quad (3)$$

где  $k \cdot x$  означает четырехмерное скалярное произведение

$$k \cdot x = k_0 x_0 - (\mathbf{k}, \mathbf{x}),$$

причем  $k_\mu$  — четырехмерный вектор, пространственные компоненты которого совпадают с компонентами трехмерного вектора  $\mathbf{k}$  § 63, а временная компонента равна  $k_0 = |\mathbf{k}|$ ; символ  $d^3k$  означает, как и в § 63,  $dk_1 dk_2 dk_3$ .

Компонента Фурье  $A_{\mu k}$  имеет часть  $A_{0k}$ , происходящую от  $A_0(x)$ , и часть  $A_{rk}$  ( $r = 1, 2, 3$ ), представляющую собой трехмерный вектор. Последний можно разложить на две части: продольную, лежащую в направлении  $\mathbf{k}$ , т. е. в направлении распространения волны, и поперечную, перпендикулярную  $\mathbf{k}$ . Продольная часть равна

$$\frac{k_r k_s}{k_0^2} A_{sk}.$$

Поперечная же часть равна

$$\left( \delta_{rs} - \frac{k_r k_s}{k_0^2} \right) A_{sk} = \mathcal{A}_{rk}. \quad (4)$$

Она удовлетворяет соотношению

$$k_r \mathcal{A}_{rk} = 0. \quad (5)$$

Из максвелловской теории света известно, что только поперечная часть существенна для электромагнитного излучения. Глава X относится только к этой поперечной части, причем величина  $A_{rk}$ , рассмотренная в § 63, есть то же самое, что вновь введенная величина  $A_{rk}$ , а уравнение (65) § 63 соответствует уравнению (5) настоящей главы. Тем не менее в полной электродинамической теории продольной частью пренебрегать нельзя, так как продольная часть связана с кулоновскими силами (это будет показано ниже).

Теперь можно разложить трехмерный вектор  $A_r(x)$  на две части: поперечную часть, имеющую только поперечные компоненты Фурье, и продольную часть, имеющую только продольную компоненту Фурье. Поперечная часть равна

$$\mathcal{A}_r(x) = \int (\mathcal{A}_{rk} e^{ik \cdot x} + \bar{\mathcal{A}}_{rk} e^{-ik \cdot x}) d^3k$$

и удовлетворяет соотношению

$$\frac{\partial \mathcal{A}_r(x)}{\partial x_r} = 0. \quad (6)$$

Продольная часть может быть представлена как градиент скаляра  $V$ , определяемого выражением

$$V = i \int \frac{k_s}{k_0^3} (A_{sk} e^{ik \cdot x} - \bar{A}_{sk} e^{-ik \cdot x}) d^3k. \quad (7)$$

Следовательно, имеем

$$A_r = \mathcal{A}_r + \frac{\partial V}{\partial x_r}. \quad (8)$$

Магнитное поле определяется поперечной частью  $A_r$

$$\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \mathcal{A}.$$

Величину  $A_0(x)$  удобно причислять к продольным величинам, так что полный потенциал  $A_\mu(x)$  делится на поперечную часть  $\mathcal{A}_r(x)$  и продольную часть, состоящую из  $A_0$  и из  $\partial V / \partial x_r$ . Это разделение, разумеется, относится к одной определенной лоренцевой системе отсчета и не должно использоваться там, где желательно сохранить релятивистскую форму уравнений.

Каждый коэффициент Фурье  $A_{\mu k}$  встречается в (3) в комбинации с временным множителем  $e^{ik_0 x_0}$ . Произведение

$$A_{\mu k} e^{ik_0 x_0} = A_{\mu k l} \quad (9)$$

образует гамильтонову динамическую переменную в классической механике и гейзенбергову динамическую переменную в квантовой механике. Вычислим СП для этих переменных.

Результаты § 63 дают нам СП для поперечной части  $A_{\mu k_l}$ . Для того чтобы установить соответствие с этими результатами, перейдем к дискретным значениям вектора  $k$  в трехмерном пространстве с координатами  $k_x, k_y, k_z$  и рассмотрим в качестве примера такое значение  $k$ , для которого  $k_1 = k_2 = 0$ ,  $k_3 = k_0 > 0$ . Тогда поляризационная переменная  $l$  может иметь два значения, относящиеся к двум направлениям 1 и 2. Из уравнений (73) § 63 с учетом перестановочных соотношений (11) § 60 для операторов  $\eta$  и  $\bar{\eta}$ , вытекает тогда

$$[\bar{A}_{1k_l}, A_{1k_l}] = [\bar{A}_{2k_l}, A_{2k_l}] = -is_k/4\pi^2k_0. \quad (10)$$

Результаты § 63 не дают никаких сведений о величинах  $A_{3k_l}$  и  $A_{0k_l}$ . Можно, однако, получить СП для величин  $A_{3k_l}$  и  $A_{0k_l}$  из соображений теории относительности. Соотношения (10) могут быть записаны в релятивистском виде. Единственный простой способ, которым это можно сделать, состоит в том, чтобы добавить к ним еще два соотношения

$$[\bar{A}_{3k_l}, A_{3k_l}] = -[\bar{A}_{0k_l}, A_{0k_l}] = -is_k/4\pi^2k_0. \quad (11)$$

Четыре уравнения (10) и (11) вместе с условием, что при  $\mu \neq \nu$  величины  $\bar{A}_{\mu k_l}$  и  $A_{\nu k_l}$  коммутируют (они должны коммутировать, поскольку они относятся к разным степеням свободы), можно объединить в одно тензорное уравнение

$$[\bar{A}_{\mu k_l}, A_{\nu k_l}] = ig_{\mu\nu}s_k/4\pi^2k_0. \quad (12)$$

Таким образом, мы получили СП для всех динамических переменных. Уравнение (12) можно обобщить, написав

$$[\bar{A}_{\mu k_l}, A_{\nu k'_l}] = ig_{\mu\nu}s_k\delta_{kk'}/4\pi^2k_0. \quad (13)$$

Вернемся к случаю сплошного спектра величины  $k$ . Для того чтобы преобразовать  $\delta_{kk'}$  к случаю сплошного спектра величины  $k$ , заметим, что для произвольной функции  $f(k)$  в трехмерном пространстве  $k$  имеет место соотношение

$$\sum_k f(k) \delta_{kk'} = f(k') = \int f(k) \delta(k - k') d^3k, \quad (14)$$

где  $\delta(k - k')$  — трехмерная дельта-функция, определяемая равенством

$$\delta(k - k') = \delta(k_1 - k'_1) \delta(k_2 - k'_2) \delta(k_3 - k'_3).$$

Для того чтобы равенство (14) согласовалось с общей формулой, связывающей сумму и интеграл (уравнение (52) § 62), нужно положить

$$s_k \delta_{kk'} = \delta(k - k'). \quad (15)$$

Таким образом, соотношение (13) принимает вид

$$[\bar{A}_{\mu kt}, A_{\nu k't}] = i g_{\mu\nu} \frac{1}{4\pi^2 k_0} \delta(k - k'). \quad (16)$$

Это уравнение совместно с уравнениями

$$[A_{\mu kt}, A_{\nu k't}] = [\bar{A}_{\mu kt}, \bar{A}_{\nu k't}] = 0 \quad (17)$$

определяют СП в теории, оперирующей со сплошным спектром  $k$ . Следует отметить, что эти соотношения остаются справедливыми, если опустить индекс  $t$ , так что они будут относиться к постоянным коэффициентам Фурье  $\bar{A}_{\mu k}$ ,  $A_{\nu k}$ .

Определим теперь оператор Гамильтона из условия, чтобы в гейзенберговской картине он приводил к той зависимости каждой динамической переменной  $A_{\mu kt}$  от времени  $t = x_0$ , какую дает формула (9) при  $A_{\mu k}$  постоянном. Обозначив этот оператор через  $H$ , мы, таким образом, требуем, чтобы было

$$[A_{\mu kt}, H] = \frac{dA_{\mu kt}}{dx_0} = ik_0 A_{\mu kt}. \quad (18)$$

Легко видеть, что это соотношение удовлетворяется, если положить

$$H_F = -4\pi^2 \int k_0^2 A_{\mu kt} \bar{A}_{\mu k} d^3k, \quad (19)$$

которое мы примем в качестве оператора Гамильтона для электромагнитного поля в отсутствие вещества (с точностью до аддитивной постоянной, не содержащей динамических переменных).

В § 63 мы воспользовались свойствами поперечной части оператора Гамильтона для того, чтобы определить СП для поперечных переменных. Здесь мы поступили в обратном порядке, именно, из СП для продольных переменных, установленных на основании соображений релятивистской инвариантности, мы нашли часть оператора Гамильтона, относящуюся к этим переменным, требуя, чтобы удовлетворялось уравнение (18).

Выпишем подробно оператор Гамильтона (19)

$$H_F = 4\pi^2 \int k_0^2 (A_{1kl} \bar{A}_{1kl} + A_{2kl} \bar{A}_{2kl} + A_{3kl} \bar{A}_{3kl} - A_{0kl} \bar{A}_{0kl}) d^3k.$$

Поперечная часть первых трех членов в подынтегральном выражении в точности равна поперечной энергии (71) § 63. Последний член в подынтегральном выражении, представляющий собой ту часть  $H_F$ , которая относится к скалярному потенциалу  $A_0$ , входит со знаком минус. Этот отрицательный знак вытекает из требований теории относительности и означает, что динамическая система, образованная переменными  $A_{0kl}$ ,  $\bar{A}_{0kl}$ , представляет собой *гармонический осциллятор с отрицательной энергией*. Кажется несколько странным, что такое нефизическое понятие, как отрицательная энергия, входит в теорию подобным образом. Мы увидим, однако, в § 77, что отрицательная энергия, относящаяся к степеням свободы, связанным с  $A_0$ , всегда компенсируется положительной энергией, относящейся к другим продольным степеням свободы, так что она практически никогда не проявляется.

## § 75. Релятивистская форма квантовых условий

Теория, развитая в предыдущем параграфе, содержит релятивистские уравнения поля, именно, уравнения (1). Для того чтобы установить, что теория полностью удовлетворяет требованиям теории относительности, мы должны показать, что им удовлетворяют перестановочные соотношения. Это вовсе не очевидно из равенства (16), где СП написаны для компонент Фурье. Релятивистскую форму перестановочных соотношений мы получим, вычислив СП  $[A_\mu(x), A_\nu(x')]$ , где  $x$  и  $x'$  — любая пара точек в пространстве-времени. Предварительно мы должны, однако, рассмотреть некоторую инвариантную сингулярную функцию, определенную в пространстве-времени.

Функция  $\delta(x_\mu x^\mu)$ , очевидно, инвариантна относительно преобразований Лоренца. Она обращается в нуль везде, кроме светового конуса с вершиной в начале координат, т. е. кроме трехмерной гиперповерхности  $x_\mu x^\mu = 0$ . Этот световой конус состоит из двух различных частей: *будущего*, для которого  $x_0 > 0$ , и *прошедшего*, для которого  $x_0 < 0$ . Функция, равная  $\delta(x_\mu x^\mu)$  для будущего и равная  $-\delta(x_\mu x^\mu)$  для прошедшего, также инвариантна относительно

преобразований Лоренца. Эта функция, равная  $\delta(x_\mu x^\mu) \frac{x_0}{|x_0|}$ , играет важную роль в теории полей, так что мы введем для нее специальное обозначение. Мы положим

$$\Delta(x) = 2\delta(x_\mu x^\mu) \frac{x_0}{|x_0|}. \quad (20)$$

Эта формула определяет функцию  $\Delta$  для любого четырехмерного вектора  $x$ . Принимая во внимание (9) § 15, мы можем выразить  $\delta(x_\mu x^\mu)$  в виде

$$\delta(x_\mu x^\mu) = \frac{1}{2} |x|^{-1} \{ \delta(x_0 - |x|) + \delta(x_0 + |x|) \}, \quad (21)$$

где  $|x|$  — длина трехмерной части  $x_\mu$ . Тогда  $\Delta(x)$  принимает вид

$$\Delta(x) = |x|^{-1} \{ \delta(x_0 - |x|) - \delta(x_0 + |x|) \}. \quad (22)$$

По определению  $\Delta(x)$  равно нулю в начале координат, и очевидно, что

$$\Delta(-x) = -\Delta(x).$$

Разложим функцию  $\Delta(x)$  в интеграл Фурье. Обозначая  $dx_0 dx_1 dx_2 dx_3$  через  $d^4x$  и  $dx_1 dx_2 dx_3$  через  $d^3x$ , получим для любого четырехмерного вектора

$$\begin{aligned} \int \Delta(x) e^{ik \cdot x} d^4x &= \\ &= \int |x|^{-1} \{ \delta(x_0 - |x|) - \delta(x_0 + |x|) \} e^{i[k_0 x_0 - (kx)]} d^4x = \\ &= \int |x|^{-1} \{ e^{ik_0|x|} - e^{-ik_0|x|} \} e^{-i(kx)} d^3x. \end{aligned}$$

Вводя полярные координаты  $|x|$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  в трехмерном пространстве  $x_1 x_2 x_3$  с полярной осью вдоль трехмерной части  $k_\mu$ , имеем

$$\begin{aligned} \int \Delta(x) e^{ik \cdot x} d^4x &= \\ &= \iiint \{ e^{ik_0|x|} - e^{-ik_0|x|} \} e^{-i|k||x|\cos\theta} |x| \sin\theta d\theta d\varphi d|x| = \\ &= 2\pi \int_0^\infty \{ e^{ik_0|x|} - e^{-ik_0|x|} \} d|x| \int_0^\pi e^{-i|k||x|\cos\theta} |x| \sin\theta d\theta = \\ &= 2\pi i |k|^{-1} \int_0^\infty \{ e^{ik_0|x|} - e^{-ik_0|x|} \} d|x| \{ e^{-i|k||x|} - e^{i|k||x|} \} = \\ &= 2\pi i |k|^{-1} \int_{-\infty}^\infty \{ e^{i(k_0 - |k|)a} - e^{i(k_0 + |k|)a} \} da = \\ &= 4\pi^2 i |k|^{-1} \{ \delta(k_0 - |k|) - \delta(k_0 + |k|) \} = 4\pi^2 i \Delta(k). \quad (23) \end{aligned}$$

Таким образом, коэффициентом Фурье оказывается снова та же функция, но с множителем  $4\pi^2 i$ . Меняя местами  $k$  и  $x$  в (23), получаем

$$\Delta(x) = -\frac{i}{4\pi^2} \int \Delta(k) e^{ik \cdot x} d^4k. \quad (24)$$

Некоторые важные свойства  $\Delta(x)$  могут быть легко выведены из ее разложения Фурье. Прежде всего формула (24) показывает, что функция  $\Delta(x)$  может быть представлена совокупностью волн, движущихся со скоростью света. Для того чтобы выразить этот результат в форме уравнения, применим оператор  $\square$  к обеим частям (24). Мы получим

$$\square \Delta(x) = -\frac{i}{4\pi^2} \int \Delta(k) \square e^{ik \cdot x} d^4k = \frac{i}{4\pi^2} \int k_\mu k^\mu \Delta(k) e^{ik \cdot x} d^4k.$$

Если учесть, что имеет место соотношение  $k_\mu k^\mu \Delta(k) = 0$ , то отсюда получается

$$\square \Delta(x) = 0. \quad (25)$$

Это уравнение справедливо во всем пространстве-времени. Можно придать смысл значению  $\square \Delta(x)$  в точке, где  $\Delta(x)$  имеет особенность, беря интеграл от  $\square \Delta(x)$  по малой области четырехмерного пространства, окружающей особую точку, и преобразуя его по теореме Гаусса к интегралу по трехмерной гиперповерхности. Уравнение (25) показывает, что интеграл по трехмерной гиперповерхности всегда исчезает.

На трехмерной гиперповерхности  $x_0 = 0$  функция  $\Delta(x)$  обращается в нуль. Определим величину  $\frac{\partial \Delta(x)}{\partial x_0}$  на этой гиперповерхности. Она, очевидно, равна нулю везде, за исключением точки  $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ , где имеется особенность. Эту особенность можно определить следующим образом. Дифференцируя обе части (24) по  $x_0$ , найдем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta(x)}{\partial x_0} &= \frac{1}{4\pi^2} \int k_0 \Delta(k) e^{ik \cdot x} d^4k = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int k_0 |\mathbf{k}|^{-1} \{ \delta(k_0 - |\mathbf{k}|) - \delta(k_0 + |\mathbf{k}|) \} e^{ik \cdot x} d^4k = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int \{ \delta(k_0 - |\mathbf{k}|) + \delta(k_0 + |\mathbf{k}|) \} e^{ik \cdot x} d^4k. \end{aligned}$$



Полагая в обеих частях равенства  $x_0 = 0$ , получаем

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial \Delta(x)}{\partial x_0} \right]_{x_0=0} &= \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int \{ \delta(k_0 - |\mathbf{k}|) + \delta(k_0 + |\mathbf{k}|) \} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})} d^4k = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})} d^3k = 4\pi \delta(x_1) \delta(x_2) \delta(x_3) = 4\pi \delta(\mathbf{x}). \quad (26) \end{aligned}$$

Таким образом, в точке  $x_1 = x_2 = x_3 = 0$  имеется особенность в виде обычной дельта-функции с коэффициентом  $4\pi$ .

Вычислим теперь выражение  $[A_\mu(x), A_\nu(x')]$ . Из соотношений (3), (16) и (17) имеем

$$\begin{aligned} [A_\mu(x), A_\nu(x')] &= \\ &= \iint [(A_{\mu k} e^{ik \cdot x} + \bar{A}_{\mu k} e^{-ik \cdot x}), (A_{\nu k'} e^{ik' \cdot x'} + \bar{A}_{\nu k'} e^{-ik' \cdot x'})] \times \\ &\times d^3k d^3k' = i \frac{g_{\mu\nu}}{4\pi^2} \iint k_0^{-1} \{ e^{-ik \cdot x} e^{ik' \cdot x'} - e^{ik \cdot x} e^{-ik' \cdot x'} \} \times \\ &\times \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') d^3k d^3k' = \\ &= i \frac{g_{\mu\nu}}{4\pi^2} \int k_0^{-1} \{ e^{-ik \cdot (x-x')} - e^{ik \cdot (x-x')} \} d^3k. \quad (27) \end{aligned}$$

Здесь  $k_0$  определено так, что оно равно  $|\mathbf{k}|$  и поэтому всегда положительно. Заменяя  $\mathbf{k}$  на  $-\mathbf{k}$  во втором члене подынтегрального выражения, находим, что (27) равно четырехмерному интегралу

$$\begin{aligned} i \frac{g_{\mu\nu}}{4\pi^2} \int |\mathbf{k}|^{-1} \{ \delta(k_0 - |\mathbf{k}|) - \delta(k_0 + |\mathbf{k}|) \} e^{-ik \cdot (x-x')} d^4k = \\ = i \frac{g_{\mu\nu}}{4\pi^2} \int \Delta(k) e^{-ik \cdot (x-x')} d^4k, \end{aligned}$$

где  $k_0$  принимает все значения, как положительные, так и отрицательные. Пользуясь (24), мы получаем окончательно

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')] = g_{\mu\nu} \Delta(x - x'). \quad (28)$$

Этот результат и показывает инвариантность СП относительно преобразований Лоренца.

Формула (28) означает, что потенциалы в двух точках пространства-времени коммутируют всегда, за исключением случая, когда линия, соединяющая эти точки, является нулевой, т. е. лучом света. Эта формула совместна с уравнениями поля  $\square A_\mu(x) = 0$ , так как, согласно уравнению (25), оператор  $\square$ , примененный к правой части, дает нуль.

## § 76. Шредингеровские динамические переменные

Для того чтобы установить инвариантность квантовой теории поля относительно преобразований Лоренца, наиболее подходящим является гейзенберговское представление. Оно и было использовано в двух предыдущих параграфах. Но для рассмотрения конкретных примеров необходимо шредингеровское представление. Шредингеровское представление теории выглядит далеко не релятивистским, так как оно относится к состоянию в определенный момент времени, так что шредингеровское представление существенно связано с определенной лоренцевой системой отсчета. Однако если с помощью гейзенберговской формы уже был установлен релятивистский характер теории, то можно не смущаться тем, что теория выглядит нерелятивистской в шредингеровской форме, поскольку известно, что эти две формы эквивалентны.

Для того чтобы производить рассмотрение в шредингеровской форме, нужно ввести подходящие динамические переменные, которые бы описывали поле в данный момент времени. Как вытекает из уравнений поля (1), задание величин  $A_\mu(x)$ ,  $\frac{\partial A_\mu(x)}{\partial x_0}$  для всех значений  $x_1, x_2, x_3$  и данного  $x_0$  достаточно для определения  $A_\mu$  при всех временах. Эти величины и могут быть поэтому взяты в качестве динамических переменных в данный момент времени, а, тем самым, и в качестве динамических переменных в шредингеровской картине. Положим

$$B_\mu = \frac{\partial A_\mu}{\partial x_0}. \quad (29)$$

Шредингеровскими переменными будут тогда  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$  (где  $x$  обозначает  $x_1, x_2, x_3$ ).

Разложение Фурье этих переменных имеет, согласно (3) и (9), вид

$$\left. \begin{aligned} A_{\mu x} &= \int (A_{\mu k t} + \bar{A}_{\mu, -k t}) e^{-i(kx)} d^3x, \\ B_{\mu x} &= i \int k_0 (A_{\mu k t} - \bar{A}_{\mu, -k t}) e^{-i(kx)} d^3k. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Преобразование Фурье можно обратить и выразить величины  $A_{\mu k t} + \bar{A}_{\mu, -k t}$  и  $A_{\mu k t} - \bar{A}_{\mu, -k t}$  через  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$  соответственно. Таким образом, величины  $A_{\mu k t}$  и  $\bar{A}_{\mu k t}$  опре-

деляются значениями  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$  при всех  $x$  (и при данном  $x_0$ ). Поэтому в качестве динамических переменных в данный момент времени можно было бы использовать также величины  $A_{\mu k t}$  и  $\bar{A}_{\mu k t}$ , которые и могли бы служить в качестве другой возможной совокупности шредингеровских динамических переменных.

Если оперировать с переменными  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$ , то нужно знать СП для них. СП могут быть получены либо из разложения Фурье (30), совместно с (16) и (17), либо из общего выражения (28). Второй путь приводит к результату быстрее. Полагая в (28)  $x'_0 = x_0$ , мы получаем соотношение

$$[A_{\mu x}, A_{\nu x'}] = 0. \quad (31)$$

Дифференцируя (28) по  $x_0$  и затем полагая  $x'_0 = x_0$ , получим, учитывая (26),

$$[B_{\mu x}, A_{\nu x'}] = 4\pi g_{\mu\nu} \delta(x - x'). \quad (32)$$

Наконец, дифференцируя (28) как по  $x_0$ , так и по  $x'_0$  и полагая затем  $x'_0 = x_0$ , получим соотношение

$$[B_{\mu x}, B_{\nu x'}] = 0, \quad (33)$$

так как  $\frac{\partial^2 \Delta(x)}{\partial x_0^2} = 0$  для  $x_0 = 0$ . Равенства (31)–(33) дают все СП для переменных  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$ . Они показывают, что с точностью до численного множителя переменные  $A_{\mu x}$  можно рассматривать как совокупность динамических координат, а переменные  $B_{\mu x}$  — как сопряженные с ними импульсы, причем дельта-функция в правой части (32) стоит вместо символа  $\delta$  с двумя индексами ввиду того, что степени свободы рассматриваемой системы образуют бесконечное и притом непрерывное множество.

Можно разложить, согласно (8) и (6), величину  $A_{rx}$  на поперечную и продольную части. То же самое можно сделать и с величиной  $B_{rx}$ , причем получится соотношение

$$B_r = \mathcal{B}_r + \frac{\partial U}{\partial x_r}, \quad (34)$$

где величины  $\mathcal{B}_r$  удовлетворяют равенству

$$\frac{\partial \mathcal{B}_r}{\partial x_r} = 0. \quad (35)$$

Если в формуле (7) заменить во втором члене подынтегрального выражения  $k$  на  $-k$ , то получится

$$V = i \int k_s k_0^{-2} (A_{s k t} + \bar{A}_{s, -k t}) e^{-i(kx)} d^3 k. \quad (36)$$

В силу того, что  $U = \partial V / \partial x_0$ , соответствующее уравнение для  $U$  напишется

$$U = - \int k_s k_0^{-1} (A_{skl} - \bar{A}_{s, -kl}) e^{-i(kx)} d^3k. \quad (37)$$

Электрическое поле дается выражением

$$\mathbb{E}_r = -B_r - \frac{\partial A_0}{\partial x_r} = -\mathcal{B}_r - \frac{\partial (A_0 + U)}{\partial x_r}. \quad (38)$$

Следовательно,

$$\operatorname{div} \mathbb{E} = -\frac{\partial B_r}{\partial x_r} - \nabla^2 A_0 = -\nabla^2 (A_0 + U). \quad (39)$$

Очевидно, что любая продольная переменная коммутирует с любой поперечной переменной. Мы выведем также некоторые полезные перестановочные соотношения. Будем пользоваться для любой функции поля  $f_x$  обозначениями

$$\frac{\partial f_x}{\partial x_r} = f_{x,r}^r, \quad \frac{\partial f_{x'}}{\partial x_r'} = f_{x',r}^{r'}. \quad (40)$$

Если положить в (32)  $\mu = r$ ,  $\nu = s$  и продифференцировать по  $x_r$ , то получится

$$[B_{r,x}, A_{sx'}] = 4\pi g_{rs} \delta^r (x - x') = -4\pi \delta^s (x - x'),$$

откуда, согласно (39), вытекает

$$[\operatorname{div} \mathbb{E}_x, A_{sx'}] = 4\pi \delta^s (x - x'). \quad (41)$$

Соотношение (39) показывает, что  $\operatorname{div} \mathbb{E}$  является функцией только от продольных переменных, так что из (41) следует

$$[\operatorname{div} \mathbb{E}_x, V_{x'}^{s'}] = 4\pi \delta^s (x - x') = -4\pi \delta^{s'} (x - x').$$

Интегрируя это соотношение по  $x_s'$ , получаем

$$[\operatorname{div} \mathbb{E}_x, V_{x'}] = -4\pi \delta (x - x'), \quad (42)$$

причем постоянная интегрирования отсутствует, так как функции поля  $\mathbb{E}_x$  и  $V_x$  составлены из волн с отличной от нуля длиной волны.

Из (42) и (39) имеем

$$\nabla^2 [U_x, V_{x'}] = 4\pi \delta (x - x').$$

Интегрируя с помощью формулы (72) § 38, получаем

$$[U_x, V_{x'}] = -|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}, \quad (43)$$

причем в правой части нет ни постоянной интегрирования, ни других членов, не исчезающих на бесконечности, поскольку  $U_x$  и  $V_x$  складываются из волн с длиной волны, отличной от нуля. Из (38) и (43) имеем

$$[\mathcal{E}_{rx}, V_x] = -[U'_x, V_x] = -(x_r - x'_r) |x - x'|^{-3}. \quad (44)$$

Выразим теперь оператор Гамильтона через переменные  $A_{\mu x}$  и  $B_{\mu x}$ . Из второго уравнения (30) имеем

$$\begin{aligned} \int B_{\mu x} B_x^\mu d^3x &= \\ &= - \int \int \int k_0 k'_0 (A_{\mu kt} - \bar{A}_{\mu, -kt}) (A_{k't}^\mu - \bar{A}_{k't}^\mu) \times \\ &\times e^{-i(kx)} e^{-i(k'x)} d^3k d^3k' d^3x = -8\pi^3 \int \int k_0 k'_0 (A_{\mu kt} - \bar{A}_{\mu, -kt}) \times \\ &\times (A_{k't}^\mu - \bar{A}_{k't}^\mu) \delta(k + k') d^3k d^3k' = \\ &= -8\pi^3 \int k_0^2 (A_{\mu kt} - \bar{A}_{\mu, -kt}) (A_{-kt}^\mu - \bar{A}_{kt}^\mu) d^3k. \end{aligned}$$

Аналогично из первого уравнения (30) имеем

$$\begin{aligned} \int A_{\mu x} A_x^{\mu r} d^3x &= - \int \int \int k_r k'_r (A_{\mu kt} + \bar{A}_{\mu, -kt}) \times \\ &\times (A_{k't}^\mu + \bar{A}_{k't}^\mu) e^{-i(kx)} e^{-i(k'x)} d^3k d^3k' d^3x = \\ &= 8\pi^3 \int k_0^2 (A_{\mu kt} + \bar{A}_{\mu, -kt}) (A_{-kt}^\mu + \bar{A}_{kt}^\mu) d^3k. \end{aligned}$$

Складывая и деля на  $-8\pi$ , получим

$$\begin{aligned} -(8\pi)^{-1} \int (B_\mu B^\mu + A_\mu^r A^{\mu r}) d^3x &= \\ &= -2\pi^2 \int k_0^2 (A_{\mu kt} \bar{A}_{kt}^\mu + \bar{A}_{\mu, -kt} A_{-kt}^\mu) d^3k. \end{aligned}$$

Это совпадает с выражением (19) для  $H_F$  с точностью до бесконечного численного слагаемого. Поскольку формула (19) уже содержит произвольное численное слагаемое, мы можем положить

$$H_F = -(8\pi)^{-1} \int (B_\mu B^\mu + A_\mu^r A^{\mu r}) d^3x, \quad (45)$$

где произвольное слагаемое уже не то, какое входит в формулу (19).

Оператор Гамильтона (45), разумеется, может быть использован для получения гейзенберговских уравнений движения, причем произвольное численное слагаемое не будет играть никакой роли.

При помощи (31)—(33) легко проверить справедливость равенств

$$\text{и} \quad \left. \begin{aligned} \frac{\partial A_\mu}{\partial x_0} &= [A_\mu, H_F] = B_\mu \\ \frac{\partial B_\mu}{\partial x_0} &= [B_\mu, H_F] = \nabla^2 A_\mu, \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

которые согласуются с (29) и (1).

Оператор (45) дает также шредингеровское уравнение движения

$$i\hbar \frac{d}{dx_0} |P\rangle = H_F |P\rangle$$

для вектора  $|P\rangle$ , представляющего состояние в шредингеровской картине. Произвольное численное слагаемое в  $H_F$  приводит лишь к умножению вектора  $|P\rangle$  на физически несущественный фазовый множитель.

Выражение (45) для  $H_F$  может быть разложено на поперечную часть  $H_{FT}$  и продольную часть  $H_{FL}$ . Из (34) имеем

$$\begin{aligned} \int B_r B_r d^3x &= \int (\mathcal{B}_r + U_r)(\mathcal{B}_r + U_r) d^3x = \\ &= \int \mathcal{B}_r \mathcal{B}_r d^3x + \int U_r U_r d^3x. \end{aligned}$$

Перекрестные члены исчезают, поскольку в силу (35) имеет место равенство

$$\int U_r \mathcal{B}_r d^3x = - \int U \mathcal{B}_r' d^3x = 0.$$

Аналогично из (8) имеем

$$\int A_r^s A_r^s d^3x = \int \mathcal{A}_r^s \mathcal{A}_r^s d^3x + \int V^{rs} V^{rs} d^3x,$$

причем перекрестные члены опять исчезают. Таким образом, выражение (45) принимает вид

$$H_F = H_{FT} + H_{FL},$$

где

$$H_{FT} = (8\pi)^{-1} \int (\mathcal{B}_r \mathcal{B}_r + \mathcal{A}_r^s \mathcal{A}_r^s) d^3x \quad (47)$$

и

$$H_{FL} = (8\pi)^{-1} \int (U^r U^r + V^{rs} V^{rs} - B_0 B_0 - A_0^r A_0^r) d^3x. \quad (48)$$

Следует отметить, что член

$$(8\pi)^{-1} \int \mathcal{A}_r^s \mathcal{A}_r^s d^3x$$

в  $H_{FT}$  может быть преобразован к виду:

$$\begin{aligned} - (8\pi)^{-1} \int \mathcal{A}_r \mathcal{A}_r^{ss} d^3x &= - (8\pi)^{-1} \int \mathcal{A}_r (\mathcal{A}_r^{ss} - \mathcal{A}_s^{rs}) d^3x = \\ &= (8\pi)^{-1} \int \mathcal{A}_r^s (\mathcal{A}_r^s - \mathcal{A}_s^r) d^3x = \\ &= (16\pi)^{-1} \int (\mathcal{A}_r^s - \mathcal{A}_s^r) (\mathcal{A}_r^s - \mathcal{A}_s^r) d^3x = (8\pi)^{-1} \int \mathcal{H}^2 d^3x, \end{aligned}$$

что как раз представляет собой магнитную энергию. Пользуясь формулой

$$\int V^{rs} V^{rs} d^3x = \int V^{rr} V^{ss} d^3x,$$

получаемой в результате интегрирования по частям, можно привести выражение (48) к виду

$$H_{FL} = (8\pi)^{-1} \int \{ (U - A_0)^r (U + A_0)^r + (V^{rr} - B_0) (V^{ss} + B_0) \} d^3x. \quad (49)$$

## § 77. Дополнительные условия

Мы должны теперь вернуться к уравнению Максвелла (2), которого мы пока не учитывали. Это уравнение нельзя непосредственно перенести в квантовую теорию, так как при этом возникает противоречие. Согласно квантовым условиям (28), левая часть уравнения (2) не коммутирует с оператором  $A_v(x')$ , так что она не может обращаться в нуль. Способ, с помощью которого можно обойти эти трудности, был указан Ферми \*). Он состоит в принятии, вместо (2), менее жесткого условия, а именно:

$$\left( \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \right) |P\rangle = 0, \quad (50)$$

причем это условие должно выполняться для любого кет-вектора  $|P\rangle$ , который соответствует состояниям, существующим в природе.

Для каждой точки пространства-времени имеется свое уравнение вида (50), и эти уравнения должны все выполняться для произвольного вектора, соответствующего физически возможному состоянию.

Будем называть условие типа (50), которому должен удовлетворять вектор, соответствующий действительному состоянию, *дополнительным условием*. Существование дополни-

\*) E. Fermi, *Reviews of Mod. Phys.*, 1932, v. 4, p. 125.

тельных условий в данной теории не означает какого-либо отступления от общих принципов квантовой механики или модификации этих принципов. Принцип суперпозиции и вся общая теория состояний динамических переменных и наблюдаемых в том виде, как она изложена в гл. II, будут применимы также и в том случае, когда имеются дополнительные условия, если только наложить на линейный оператор, долженствующий представлять наблюдаемую, следующее требование. Мы определим линейный оператор как *физический*, если в результате его действия на кет-вектор, удовлетворяющий дополнительным условиям, получается другой кет, также удовлетворяющий дополнительным условиям. Для того чтобы линейный оператор мог представлять наблюдаемую, он, очевидно, должен быть физическим; это требование добавляется к требованиям § 10.

Мы уже имели пример дополнительных условий в теории систем, содержащих несколько одинаковых частиц. Мы имели там условие, что только симметричные или только антисимметричные волновые функции представляют состояния, действительно встречающиеся в природе. Это есть условие точно такого же типа, как и (50), и оно подходит под только что данное определение дополнительного условия. В теории систем одинаковых частиц требование, чтобы линейный оператор был физическим, означает, что он должен быть симметричным по отношению к одинаковым частицам.

Когда в теорию введены дополнительные условия, то нужно проверить, что они согласуются друг с другом, т. е. что они не являются настолько жесткими, что им нельзя удовлетворить. Если имеется более чем одно дополнительное условие, то из них можно вывести еще другие условия, составляя СП для входящих в них операторов. Так, если имеются уравнения

$$U|P\rangle = 0, \quad V|P\rangle = 0, \quad (51)$$

то можно вывести из них как следствие уравнения

$$[U, V]|P\rangle = 0, \quad [U, [U, V]]|P\rangle = 0 \quad (52)$$

и т. д. Для того чтобы убедиться в совместности дополнительных условий, мы должны рассмотреть все дополнительные условия, получаемые подобным путем, и показать, что, начиная с некоторого места, все дальнейшие дополни-



тельные условия либо удовлетворяются тождественно, либо являются повторением предыдущих.

Нужно также убедиться в том, что дополнительные условия согласуются с уравнениями движения. В гейзенберговской картине, для которой кет-вектор состояния  $|P\rangle$  в (51) фиксирован, мы будем иметь различные дополнительные условия, относящиеся к различным временам, и они все должны быть совместны в том смысле, который был разъяснен выше. В шредингеровской картине, где кет  $|P\rangle$  меняется со временем согласно уравнению Шредингера, мы потребуем, чтобы вектор  $|P\rangle$  удовлетворял дополнительному условию всегда, если он удовлетворяет ему в начальный момент. Это означает, что дополнительным условиям должно удовлетворять выражение  $\frac{d}{dt} |P\rangle$ , т. е. что им должен удовлетворять кет-вектор  $H |P\rangle$ ; значит оператор  $H$  должен быть физическим.

В том случае, когда имеется дополнительное условие вида  $U |P\rangle = 0$ , будем писать для удобства

$$U \approx 0 \quad (53)$$

и называть (53) слабым равенством, в отличие от обычного или сильного равенства. Слабое равенство дает другое слабое равенство, если умножить его на некоторый множитель слева, но не приводит, вообще говоря, к правильному уравнению при умножении справа. Следовательно, слабое равенство нельзя использовать при вычислении СП. Условие совместимости дополнительных условий (т. е. равенство (52)) может быть сформулировано как требование, чтобы СП динамических переменных с каждым из операторов, входящих в дополнительные условия, обращались в нуль слабым образом.

Для того чтобы динамическая переменная  $\xi$  была физической, нужно, чтобы для каждого дополнительного условия  $U |P\rangle = 0$  имело место соотношение

$$U \xi |P\rangle = 0,$$

откуда

$$[U, \xi] |P\rangle = 0.$$

Таким образом, СП динамической переменной с каждым оператором, входящим в дополнительные условия, должна обращаться в нуль слабым образом.

Вернемся теперь к электродинамике. Будем считать уравнение (2) слабым, так что его следует писать в виде

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \approx 0. \quad (54)$$

В гейзенберговской картине для каждой точки  $x$  имеется одно такое уравнение. Для того чтобы проверить совместность уравнений, возьмем две произвольные точки  $x$  и  $x'$  в пространстве-времени и образуем СП

$$\left[ \frac{\partial A_\mu(x)}{\partial x_\mu}, \frac{\partial A_\nu(x')}{\partial x'_\nu} \right] = \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x'_\nu} [A_\mu(x), A_\nu(x')].$$

Принимая во внимание (28) и (25) и производя вычисление, получим для СП равенство

$$g_{\mu\nu} \frac{\partial^2 \Delta(x-x')}{\partial x_\mu \partial x'_\nu} = -\square \Delta(x-x') = 0,$$

так что требование совместности выполняется сильным образом. Поскольку установлена совместность дополнительных условий во все моменты времени в гейзенберговской картине, то тем самым доказана согласованность дополнительных условий с уравнениями движения.

Так как соотношение (54) является лишь слабым уравнением, любое его следствие, имеющее место в теории Максвелла, будет справедливо в квантовой теории только как слабое уравнение. Уравнения

$$\operatorname{div} \mathcal{H} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\operatorname{rot} \mathcal{E}$$

являются следствиями определения  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  через потенциалы, так что в квантовой теории они выполняются сильным образом. Остальные максвелловы уравнения для вакуума, именно

$$\operatorname{div} \mathcal{E} \approx 0, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} \approx \operatorname{rot} \mathcal{H} \quad (55)$$

являются в квантовой теории слабыми уравнениями, поскольку для их вывода нужно пользоваться не только уравнением (1), но и соотношением (54).

Напряженности полей  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  являются компонентами антисимметричного тензора  $\frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu}$ . СП тензора с

оператором (54) в произвольной точке  $x'$  равна

$$\left[ \left( \frac{\partial A^{\nu}(x)}{\partial x_{\mu}} - \frac{\partial A^{\mu}(x)}{\partial x_{\nu}} \right), \frac{\partial A_{\sigma}(x')}{\partial x'_{\sigma}} \right] = \\ = g_{\sigma}^{\nu} \frac{\partial^2 \Delta(x-x')}{\partial x_{\mu} \partial x'_{\sigma}} - g_{\sigma}^{\mu} \frac{\partial^2 \Delta(x-x')}{\partial x_{\nu} \partial x'_{\sigma}} = 0.$$

Отсюда вытекает, что величины  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  являются физическими. Потенциалы же  $A_{\mu}$  не являются физическими.

Дополнительные условия, которым подчиняются динамические переменные в некоторый определенный момент времени, имеют вид

$$\frac{\partial A_{\mu}}{\partial x_{\mu}} \approx 0, \quad \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial A_{\mu}}{\partial x_{\mu}} \approx 0. \quad (56)$$

Дальнейшее дифференцирование по  $x_0$  не дает новых независимых уравнений, а дает лишь уравнения, являющиеся следствием (56) и сильного уравнения (1). Будучи выраженными через шредингеровские переменные § 76, дополнительные условия имеют вид

$$B_0 + A_r' \approx 0, \quad (57)$$

$$(A_0' + B_r)' \approx 0. \quad (58)$$

Уравнение (58) есть то же самое, что первое из уравнений (55) и может быть также записано с помощью (39) в виде

$$\nabla^2 (A_0 + U) \approx 0.$$

Так как оно выполняется во всем трехмерном пространстве, то из него следует

$$A_0 + U \approx 0. \quad (59)$$

Замечая, что  $A_r' = V^{rr}$ , можно вывести из (49) соотношение

$$H_{FL} \approx 0. \quad (60)$$

Таким образом, для состояний, встречающихся в природе, энергия продольного поля отсутствует.

Для того чтобы установить удобное представление, введем стандартный кет  $|0_F\rangle$ , удовлетворяющий дополнительным условиям

$$(B_0 + A_r')|0_F\rangle = 0, \quad (A_0 + U)|0_F\rangle = 0, \quad (61)$$

а также удовлетворяющий соотношению

$$\bar{\mathcal{A}}_{rk} |0_F\rangle = 0. \quad (62)$$

Эти условия совместны, потому что оператор  $\bar{\mathcal{A}}_{rk}$  коммутирует с операторами в (61); они достаточны для полного определения вектора  $|0_F\rangle$  с точностью до числового множителя, потому что единственными независимыми динамическими переменными, которые мы имеем, являются величины  $A_0, B_0, U, A'_r, \mathcal{A}_{rk}, \bar{\mathcal{A}}_{rk}$ , а составленные из них комбинации  $A_0 + U, B_0 + A'_r, \bar{\mathcal{A}}_{rk}$  образуют полный набор коммутирующих переменных. Исходя из этого стандартного кет-вектора, мы можем выразить любой кет в виде

$$\Psi(A_0, B_0, \mathcal{A}_{rk}) |0_F\rangle. \quad (63)$$

Это представление есть как раз фоковское представление по отношению к поперечным динамическим переменным  $\mathcal{A}_{rk}$ ,  $\bar{\mathcal{A}}_{rk}$ , так что  $\Psi$  должно быть степенным рядом по переменным  $\mathcal{A}_{rk}$ , причем различные члены ряда соответствуют различным числам фотонов. Переменные, входящие в  $\Psi$ , образуют непрерывное бесконечное множество, и, таким образом,  $\Psi$  есть то, что математики называют «функционалом».

Если кет (63) удовлетворяет нашим дополнительным условиям, то  $\Psi$  не должно зависеть от  $A_0$  и  $B_0$ , и должно быть функцией только от  $\mathcal{A}_{rk}$ . Таким образом, физические состояния представляются кет-векторами вида

$$\Psi(\mathcal{A}_{rk}) |0_F\rangle, \quad (64)$$

где  $\Psi$  есть степенной ряд по переменным  $\mathcal{A}_{rk}$ . Сам по себе стандартный кет  $|0_F\rangle$  представляет физическое состояние без фотонов, т. е. абсолютный вакуум.

До сих пор наш оператор Гамильтона  $H_F$  и его части  $H_{FT}$ ,  $H_{FL}$  содержали произвольные численные слагаемые. Удобно выбрать эти последние так, чтобы  $H_{FL}$  и  $H_{FT}$  давали нуль для абсолютного вакуума. Результат (60) показывает, что в выражениях (48) или (49) для  $H_{FL}$  числовое слагаемое выбрано правильно и именно так, что  $H_{FL}$  равно нулю для абсолютного вакуума так же, как и для любого другого физического состояния. В качестве  $H_{FT}$  следует взять выражение

$$H_{FT} = 4\pi^2 \int k_0^3 \mathcal{A}_{rk} \mathcal{A}_{rk} d^3k, \quad (65)$$

представляющее собой поперечную часть (19); этим достигается исчезновение нулевой энергии фотонов. Выражение (47) отличается от (65) на бесконечное численное слагаемое, составленное из нулевых энергий по половине кванта энергии на каждое фотонное состояние.

### § 78. Электроны и позитроны в отсутствие поля

Рассмотрим теперь электроны и позитроны в отсутствие электромагнитного поля. Состояние электрона описывается, как в гл. XI, волновой функцией  $\psi$  с четырьмя компонентами  $\psi_a$  ( $a = 1, 2, 3, 4$ ), удовлетворяющей волновому уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_0} = -i\hbar \alpha_r \frac{\partial \psi}{\partial x_r} + \alpha_m m \psi. \quad (66)$$

Для того чтобы перейти к многоэлектронной теории, нужно применить метод вторичного квантования § 65, в котором одноэлектронная волновая функция заменяется совокупностью операторов, удовлетворяющих определенным соотношениям антикоммутации.

Когда мы будем иметь дело со значениями  $\psi$  в разных точках в данный момент времени, мы будем писать  $\psi_x$ , где  $x$  означает  $x_1, x_2, x_3$ . Компоненты  $\psi_x$  будут  $\psi_{ax}$ . Переход к импульсному представлению, характеризуемому волновой функцией  $\psi_p$ , достигается с помощью трехмерного разложения Фурье

$$\psi_x = \hbar^{-\frac{3}{2}} \int e^{\frac{i(xp)}{\hbar}} \psi_p d^3p, \quad \psi_p = \hbar^{-\frac{3}{2}} \int e^{-\frac{i(xp)}{\hbar}} \psi_x d^3x. \quad (67)$$

Функция  $\psi_p$  имеет четыре компоненты  $\psi_{ap}$ , соответствующие четырем компонентам  $\psi_{ax}$ . В этом представлении оператор энергии имеет вид

$$p_0 = \alpha_r p_r + \alpha_m m,$$

где действие операторов импульса  $p_r$  сводится к умножению. Можно разбить  $\psi$  на положительно-энергетическую часть  $\xi$  и отрицательно-энергетическую часть  $\zeta$ , причем каждая имеет четыре компоненты подобно самой функции  $\psi$ . В импульсном представлении величины  $\xi$  и  $\zeta$  равны

$$\left. \begin{aligned} \xi_p &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \psi_p, \\ \zeta_p &= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \psi_p. \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

В самом деле, эти уравнения приводят к соотношениям

$$\begin{aligned} p_0 \xi_p &= (\alpha_r p_r + \alpha_m m) \xi_p = \\ &= \frac{1}{2} \{ \alpha_r p_r + \alpha_m m + (p^2 + m^2)^{1/2} \} \psi_p = (p^2 + m^2)^{1/2} \xi_p \end{aligned}$$

и

$$p_0 \zeta_p = - (p^2 + m^2)^{1/2} \zeta_p.$$

Отсюда видно, что  $\xi_p$  и  $\zeta_p$  являются собственными функциями оператора  $p_0$  с собственными значениями  $(p^2 + m^2)^{1/2}$  и  $-(p^2 + m^2)^{1/2}$  соответственно. При вычислениях с операторами

$$\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}, \quad \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}$$

следует иметь в виду, что квадраты их равны им самим, а их произведения в любом порядке равны нулю.

Вторичное квантование превращает функции  $\psi$  в операторы, аналогичные операторам  $\bar{\eta}$  § 65 и удовлетворяющие соотношениям антикоммутации вида (11) § 65.

Пользуясь обозначением для антикоммутатора

$$MN + NM = [M, N]_+, \quad (69)$$

имеем

$$\left. \begin{aligned} [\psi_{ax}, \psi_{bx'}]_+ &= 0, \quad [\bar{\psi}_{ax}, \bar{\psi}_{bx'}]_+ = 0, \\ [\psi_{ax}, \bar{\psi}_{bx'}]_+ &= \delta_{ab} \delta(x - x'). \end{aligned} \right\} \quad (70)$$

Функция  $\delta(x - x')$  появляется в последнем уравнении вследствие того, что  $x$  меняется непрерывно. После преобразования к импульсному представлению, согласно (67), получаем

$$\left. \begin{aligned} [\psi_{ap}, \psi_{bp'}]_+ &= 0, \quad [\bar{\psi}_{ap}, \bar{\psi}_{bp'}]_+ = 0, \\ [\psi_{ap}, \bar{\psi}_{bp'}]_+ &= \delta_{ab} \delta(p - p'). \end{aligned} \right\} \quad (71)$$

Для величин  $\xi$  и  $\zeta$ , определяемых выражениями (68), последнее из уравнений (71) дает

$$\begin{aligned} [\xi_{ap}, \xi_{bp'}]_+ &= \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}_{ac} [\psi_{cp}, \bar{\psi}_{dp'}]_+ \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_s p'_s + \alpha_m m}{(p'^2 + m^2)^{1/2}} \right\}_{db} = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}_{ab} \delta(p - p'), \end{aligned} \quad (72)$$

а также

$$[\xi_{ap}, \xi_{bp'}]_+ = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}_{ab} \delta(p - p') \quad (73)$$

и

$$[\xi_{ap}, \xi_{bp'}]_+ = [\xi_{ap}, \xi_{bp'}]_+ = 0.$$

Согласно толкованию § 65 операторы  $\psi_{ap}$  представляют операторы аннигиляции электрона с импульсом  $p$ , а  $\bar{\psi}_{ap}$  — операторы рождения электрона с импульсом  $p$ . Для того чтобы избежать нефизического понятия электронов с отрицательной энергией, нужно перейти к новой интерпретации, основанной на теории позитронов § 73. Аннигиляцию электрона с отрицательной энергией следует понимать как образование дырки в море электронов с отрицательной энергией, т. е. как образование позитрона. Таким образом, операторы  $\xi_{ap}$  становятся операторами рождения позитрона. Позитрон имеет импульс  $-p$ , поскольку импульс  $p$  уничтожается. Аналогично  $\bar{\xi}_{ap}$  становится оператором аннигиляции позитрона с импульсом  $-p$ . Величины  $\bar{\xi}_{ap}$  и  $\bar{\xi}_{ap}$  являются операторами аннигиляции и соответственно рождения обычного электрона с положительной энергией и импульсом  $p$ .

Следует отметить, что хотя  $\xi_p$  имеет четыре компоненты, только две из них являются независимыми; в самом деле, четыре компоненты связаны соотношением

$$\left\{ 1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \xi_p = 0,$$

приводящим к двум независимым уравнениям. Две независимые компоненты  $\xi_p$  соответствуют аннигиляции электрона в каждом из двух независимых спиновых состояний. Аналогично  $\bar{\xi}_p$  имеет только две независимые компоненты в силу соотношения

$$\left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \bar{\xi}_p = 0,$$

и они соответствуют рождению позитрона в двух независимых спиновых состояниях.

Состояние вакуума, в котором нет ни электронов, ни позитронов, представляется кет-вектором  $|0_p\rangle$ , удовлетворяющим условиям

$$\xi_{ap} |0_p\rangle = 0, \quad \bar{\xi}_{ap} |0_p\rangle = 0. \quad (74)$$

Этот вектор может быть использован в качестве стандартного кет-вектора данного представления. Тогда любой кет может быть выражен в виде

$$\Psi(\bar{\xi}_{ap}, \xi_{ap})|0_p\rangle,$$

где функция, или, вернее, функционал  $\Psi$ , является степенным рядом по переменным  $\bar{\xi}_{ap}, \xi_{ap}$ . Каждый член в  $\Psi$  аналогичен (17') § 65. Он не должен содержать какую-либо из переменных в степени выше первой. Каждый член соответствует существованию некоторого числа электронов (с положительной энергией) и некоторого числа позитронов в состояниях, характеризующихся индексами при переменных.

Согласно формуле (12) § 65 полное число электронов равно интегралу  $\int \bar{\psi}_{ap} \psi_{ap} d^3p$ , просуммированному по  $a$ . Если пользоваться теми же обозначениями, что в уравнении (12) § 67, это число можно записать в виде  $\int \bar{\psi}_p^+ \psi_p d^3p$ . Переходя с помощью (67) к координатному представлению, имеем

$$h^{-3} \iiint e^{i(\mathbf{x}\mathbf{p})/\hbar} e^{-i(\mathbf{x}'\mathbf{p})/\hbar} \bar{\psi}_x^+ \psi_x d^3x d^3x' d^3p = \int \bar{\psi}_x^+ \psi_x d^3x,$$

откуда видно, что плотность электронов есть  $\bar{\psi}_x^+ \psi_x$ . Это выражение включает бесконечную постоянную, представляющую плотность моря электронов с отрицательной энергией.

Более непосредственный физический смысл имеет полный заряд  $Q$ , равный разности числа электронов с положительной энергией и числа дырок или позитронов, умноженной на  $-e$ . Мы имеем

$$Q = -e \int (\bar{\xi}_p^+ \xi_p - \bar{\zeta}_p^+ \zeta_p) d^3p. \quad (75)$$

Можно преобразовать это выражение с помощью уравнений (68). Транспонируя второе из этих уравнений, имеем

$$\zeta_p^+ = \frac{1}{2} \bar{\psi}_p^+ \left\{ 1 - \frac{\alpha_r^+ p_r + \alpha_m^+ m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\}.$$

Используя это соотношение, получаем для  $Q$  выражение

$$Q = -e \int \left\{ \bar{\psi}_p^+ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right) \psi_p - \right. \\ \left. - \bar{\psi}_p^+ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\alpha_r^+ p_r + \alpha_m^+ m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right) \bar{\psi}_p \right\} d^3p.$$



Далее, для любой матрицы  $\alpha$ , у которой сумма диагональных элементов равна нулю, соотношения антикоммутиации (71) дают

$$\bar{\psi}_p^+ \alpha \psi_{p'} + \psi_p^+ \alpha^+ \bar{\psi}_p = \alpha_{ab} (\bar{\psi}_{ap} \psi_{bp'} + \psi_{bp'} \bar{\psi}_{ap}) = \\ = \alpha_{aa} \delta(p - p') = 0. \quad (76)$$

Можно считать, что этот результат остается в силе и в точке  $p' = p$ . Следовательно, выражение для  $Q$  сводится к

$$Q = -e \int \frac{1}{2} (\bar{\psi}_p^+ \psi_p - \psi_p^+ \bar{\psi}_p) d^3p.$$

Переходя к координатному представлению, получаем

$$Q = -e \int \frac{1}{2} (\bar{\psi}_x^+ \psi_x - \psi_x^+ \bar{\psi}_x) d^3x,$$

откуда видно, что плотность заряда равна

$$j_{0x} = -\frac{1}{2} e (\bar{\psi}_x^+ \psi_x - \psi_x^+ \bar{\psi}_x). \quad (77)$$

Интерпретация одноэлектронной волновой функции в § 68 дает наряду с плотностью вероятности  $\bar{\psi}^+ \psi$  также поток вероятности  $\bar{\psi}^+ \alpha \psi$ . После вторичного квантования мы должны получить соответственный поток электронов с оператором  $\bar{\psi}_x^+ \alpha \psi_x$ . Море электронов с отрицательной энергией в целом не создает потока электронов по соображениям симметрии, так что электрический ток равен

$$j_{rx} = -e \bar{\psi}_x^+ \alpha_r \psi_x. \quad (78)$$

Полная энергия электронов по формуле (29) § 60, справедливой также для фермионов, равна

$$H_p = \int \bar{\psi}_p^+ p_0 \psi_p d^3p = \int \bar{\psi}_p^+ (\alpha_r p_r + \alpha_m m) \psi_p d^3p. \quad (79)$$

После преобразования к координатному представлению это выражение принимает вид

$$H_p = \int \bar{\psi}_x^+ (-i\hbar \alpha_r \psi'_x + \alpha_m m \psi_x) d^3x. \quad (80)$$

Это выражение для полной энергии содержит бесконечное численное слагаемое, представляющее энергию моря электронов с отрицательной энергией.

Мы получим величину, имеющую больший физический смысл, если вычислим энергию всех электронов и позитронов, считая энергию вакуума нулем. Эта величина равна

$$H_P = \int (p^2 + m^2)^{1/2} (\bar{\xi}_p^+ \xi_p + \bar{\zeta}_p \zeta_p) d^3 p. \quad (81)$$

Пользуясь выражениями (68), имеем

$$\begin{aligned} H_P &= \int (p^2 + m^2)^{1/2} \left\{ \bar{\psi}_p^+ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right) \psi_p + \right. \\ &\quad \left. + \psi_p^+ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\alpha_r^+ p_r + \alpha_m^+ m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right) \bar{\psi}_p \right\} d^3 p = \\ &= \int \frac{1}{2} \{ \bar{\psi}_p^+ (\alpha_r p_r + \alpha_m m) \psi_p - \psi_p^+ (\alpha_r^+ p_r + \alpha_m^+ m) \bar{\psi}_p \} d^3 p + \\ &\quad + \int (p^2 + m^2)^{1/2} \frac{1}{2} (\bar{\psi}_p^+ \psi_p + \psi_p^+ \bar{\psi}_p) d^3 p. \quad (82) \end{aligned}$$

В силу (76) первый член (82) совпадает с (79) и в точности равен  $H_{P'}$ . Второй член является бесконечной постоянной и представляет собой взятую со знаком минус энергию всех электронов с отрицательной энергией в вакууме.

В качестве оператора Гамильтона можно принять либо  $H_P$ , либо  $H_{P'}$ . Гейзенберговское уравнение движения для  $\psi_{ax}$  имеет вид

$$\frac{\partial \psi_{ax}}{\partial x_0} = [\psi_{ax}, H_P] = [\psi_{ax}, H_{P'}],$$

и если раскрыть выражения в правой части, то мы вернемся как раз к уравнению (66) для  $\psi$ .

Теперь нужно выяснить вопрос, является ли теория релятивистской. Она построена из операторов  $\psi$ , удовлетворяющих уравнениям поля (66). Эти уравнения совпадают с уравнением для одноэлектронной волновой функции и являются инвариантными относительно преобразований Лоренца при условии, что  $\psi$  преобразуется по закону (20) § 68. Наша теория идет дальше одноэлектронной теории в том смысле, что в ней вводятся соотношения антикоммутирования для  $\psi$  и  $\bar{\psi}$ , и поэтому возникает необходимость проверить, инвариантны ли эти соотношения антикоммутирования относительно преобразований Лоренца.

Будем действовать по методу, аналогичному § 75. Выберем две произвольные точки  $x$  и  $x'$  в пространстве

времени и образуем антикоммутиатор

$$K_{ab}(x, x') = \psi_a(x) \bar{\psi}_b(x') + \bar{\psi}_b(x') \psi_a(x). \quad (83)$$

Его можно было бы вычислить, используя непосредственно соотношения антикоммутиации (71) для компонент Фурье от  $\psi$  и  $\bar{\psi}$ . Более простой путь основан на использовании некоторых свойств, которые должны иметь выражение  $K_{ab}(x, x')$ .

I.  $K_{ab}(x, x')$  содержит  $x_\mu$  и  $x'_\mu$  только в виде разности

$$x_\mu - x'_\mu.$$

II.  $K_{ab}$  должно удовлетворять волновому уравнению

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar \alpha_r \frac{\partial}{\partial x_r} - \alpha_m m \right)_{ab} K_{bc}(x, x') = 0, \quad (84)$$

это следует из того, что  $\psi(x)$  удовлетворяет уравнению (66).

III. При  $x_0 = x'_0$  величина  $K_{ab}$  имеет значение  $\delta_{ab} \delta(x - x')$ ; это вытекает из третьего уравнения (70).

Этих свойств достаточно для полного определения величины  $K_{ab}(x, x')$ , так как свойство (III) фиксирует значение  $K_{ab}$  при  $x_0 = x'_0$ ; свойство (II) показывает зависимость  $K_{ab}$  от  $x_0$ , а свойство (I) показывает тогда зависимость  $K_{ab}$  от  $x'_0$ . Как легко видеть, определение  $K_{ab}$  по этим условиям приводит к следующему результату:

$$K_{ab}(x, x') = h^{-3} \sum \frac{1}{2} \left\{ 1 + (\alpha_r p_r + \alpha_m m) \frac{1}{p_0} \right\}_{ab} e^{-i(x - x') \cdot p / \hbar} d^3 p. \quad (85)$$

Здесь  $\sum$  означает суммирование по обоим значениям  $p_0$ , равным  $\pm (p^2 + m^2)^{1/2}$ , при данных  $p_1, p_2, p_3$ . Это выражение удовлетворяет требованию (II), так как оператор в (84) создает в подынтегральном выражении (85) множитель  $(p_0 - \alpha_r p_r - \alpha_m m)$ , который дает нуль при умножении слева на выражение в фигурных скобках. Оно удовлетворяет требованию (III), поскольку при  $x_0 = x'_0$  вторые члены в фигурных скобках при суммировании по  $p_0$  сокращаются.

Закон преобразования для  $\psi$  и  $\bar{\psi}$ , полученный в § 68, приводит к тому, что величины  $\bar{\psi}^+(x') \alpha_\mu \psi(x)$  преобразуются как четыре компоненты четырехмерного вектора, а вели-

чина  $\bar{\psi}^+(x')\alpha_m\psi(x)$  является инвариантом. Следовательно, выражение

$$l^\mu \bar{\psi}^+(x')\alpha_\mu\psi(x) + S\bar{\psi}^+(x')\alpha_m\psi(x) \quad (86)$$

инвариантно при любом четырехмерном векторе  $l^\mu$  и при любом скаляре  $S$ . Условие инвариантности (86) должно быть достаточно для того, чтобы обеспечить правильный закон преобразования  $\psi$  и  $\bar{\psi}$ , так как, если положить  $l^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ ,  $S = -m$ , оно позволяет вывести инвариантность волнового уравнения для  $\psi$ .

Инвариантность (86) приводит к инвариантности выражения

$$(l^\mu\alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab} \{\bar{\psi}_a(x')\psi_b(x) + \psi_b(x)\bar{\psi}_a(x')\}.$$

Значит, выражение

$$(l^\mu\alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab} K_{ba}(x, x'), \quad (87)$$

в котором  $K_{ba}(x, x')$  определено формулой (85), тоже должно быть инвариантно. Инвариантности выражения (87) должно быть достаточно для обеспечения инвариантности соотношений антикоммутации. Из (87) имеем

$$\begin{aligned} h^{-3} \int \sum \frac{1}{2} (l^\mu\alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab} (p_0 + \alpha_r p_r + \alpha_m m)_{ba} \times \\ \times e^{\frac{-i(x-x') \cdot p}{\hbar}} p_0^{-1} d^3 p = \\ = h^{-3} \int \sum \frac{1}{2} \{ (l_0 - l_s \alpha_s + S\alpha_m) (p_0 + \alpha_r p_r + \alpha_m m) \}_{aa} \times \\ \times e^{-i(x-x') \cdot p / \hbar} p_0^{-1} d^3 p = \\ = h^{-3} \int \sum 2 (l_0 p_0 - l_r p_r + S m) e^{-i(x-x') \cdot p / \hbar} p_0^{-1} d^3 p. \quad (88) \end{aligned}$$

Это выражение инвариантно относительно преобразований Лоренца, так как величина  $p_0^{-1} d^3 p$  инвариантна. Итак, релятивистская инвариантность теории доказана.

## § 79. Взаимодействие

Полный оператор Гамильтона для электронов и позитронов, взаимодействующих с электромагнитным полем, имеет вид

$$H = H_F + H_P + H_Q, \quad (89)$$

где  $H_F$  есть оператор Гамильтона для электромагнитного поля в отсутствие частиц (он определяется выражением (19) или (45)), а  $H_P$  есть оператор Гамильтона электронов и позитронов в отсутствие поля, определяемый выражениями (80) или (81); наконец,  $H_Q$  есть энергия взаимодействия, содержащая как динамические переменные электронов и позитронов, так и динамические переменные электромагнитного поля. Мы положим

$$H_Q = \int A^\mu j_\mu d^3x, \quad (90)$$

где  $j_\mu$  определяется выражениями (77) и (78), и увидим далее, что это дает правильные уравнения движения. Итак, отбрасывая бесконечные численные слагаемые, имеем

$$H = \int \{ \bar{\psi}^+ \alpha_r (-i\hbar \psi^r - e A^r \psi) + \bar{\psi}^+ \alpha_m m \psi - \\ - \frac{1}{2} e A^0 (\bar{\psi}^+ \psi - \psi^+ \bar{\psi}) \} d^3x - (8\pi)^{-1} \int (B_\mu B^\mu + A_\mu^r A^{\mu r}) d^3x. \quad (91)$$

Рассмотрим гейзенберговские уравнения движения, к которым приводит оператор Гамильтона (91).

Мы имеем

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{ax}}{\partial x_0} = \psi_{ax} H - H \psi_{ax} = \psi_{ax} (H_P + H_Q) - (H_P + H_Q) \psi_{ax} = \\ = \int [\psi_{ax}, \bar{\psi}_{bx'}]_+ \{ \alpha_r (-i\hbar \psi_{x'}^r - e A_{x'}^r \psi_{x'}) + \alpha_m m \psi_{x'} - \\ - e A_{x'}^0 \psi_{x'} \} d^3x' = \{ \alpha_r (-i\hbar \psi_x^r - e A_x^r \psi_x) + \alpha_m m \psi_x - \\ - e A_x^0 \psi_x \} a.$$

Таким образом,

$$\left\{ \alpha_\mu \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} + e A^\mu \right) - \alpha_m m \right\} \psi = 0. \quad (92)$$

Это согласуется с одноэлектронным уравнением (11) гл. XI. Так как оператор  $H$  вещественный, то уравнение движения для  $\bar{\psi}$  будет сопряженным с уравнением движения для  $\psi$  и, следовательно, будет соответствовать уравнению (12) § 67. Таким образом, взаимодействие (90) правильно выражает действие поля на электроны и позитроны. Далее, используя соотношения (46), имеем

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x_0} = [A_\mu, H] = [A_\mu, H_F] = B_\mu, \quad (93)$$

а также

$$\begin{aligned}\frac{\partial B_{\mu x}}{\partial x_0} &= [B_{\mu x}, H] = [B_{\mu x}, H_F] + [B_{\mu x}, H_Q] = \\ &= \nabla^2 A_{\mu x} + \int [B_{\mu x}, A_{x'}^v] j_{vx} d^3 x' = \nabla^2 A_x + 4\pi j_{\mu x}.\end{aligned}\quad (94)$$

Уравнения (93) и (94) приводят к следующему:

$$\square A_\mu = 4\pi j_\mu. \quad (95)$$

Этот результат согласуется с теорией Максвелла и показывает, что взаимодействие (90) правильно описывает действие электронов и позитронов на поле.

Для того чтобы завершить теорию, нужно ввести дополнительные условия (54). Мы должны проверить, согласуются ли они с уравнениями движения. Метод, использованный в § 77 и состоящий в том, что доказывается совместность дополнительных условий для различных моментов времени в гейзенберговской картине, здесь неприменим по следующей причине. Квантовые условия, связывающие динамические переменные в различные моменты времени, под влиянием взаимодействия видоизменяются, притом так, что вычисления оказываются слишком сложными. Поэтому мы поступим иначе: мы получим все дополнительные условия, которым подчиняются динамические переменные для данного момента времени, и затем проверим, являются ли они совместными.

Обратимся опять к уравнениям (56). Дальнейшее дифференцирование по  $x_0$  дает

$$\square \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \approx 0. \quad (96)$$

С другой стороны, из уравнения движения для  $\psi$ , именно, из (92) следует, как в § 68, что

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi}^+ \alpha_\mu \psi) = 0.$$

Это равносильно уравнению

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0, \quad (97)$$

поскольку разность между величинами  $e\bar{\psi}^+\psi$  и  $j_0$  постоянна во времени, даже если она и бесконечна. Теперь

из (95) видно, что уравнение (96) выполняется как сильное уравнение. Следовательно, уравнения (56) являются единственными независимыми дополнительными условиями для динамических переменных в данный момент времени. Первое из них приводит к (57), как и ранее, а второе из них дает теперь, с учетом (95) при  $\mu = 0$ , уравнение

$$(A_0' + B_r)r' + 4\pi j_0 \approx 0. \quad (98)$$

Последнее уравнение может быть записано в виде

$$(A_0 + U)r'' + 4\pi j_0 \approx 0 \quad (99)$$

или, принимая во внимание (39), в виде

$$\operatorname{div} \mathbb{E} - 4\pi j_0 \approx 0, \quad (100)$$

что как раз и есть одно из уравнений Максвелла.

Можно видеть без подробных вычислений, что для любых двух точек  $x$  и  $x'$  в один и тот же момент времени справедливо соотношение

$$[j_{0x}, j_{0x'}] = 0,$$

так как, согласно (70), СП должна быть пропорциональна  $\delta(x - x')$  и не может содержать производных от  $\delta(x - x')$ , а в то же время СП должна быть антисимметрична относительно  $x$  и  $x'$ . Таким образом, члены  $4\pi j_{0x}$  в уравнении (98), являющиеся добавочными по отношению к уравнению (58), коммутируют друг с другом при всех  $x$  и  $x'$ , а также коммутируют со всеми другими динамическими переменными, входящими в условия (58) и (57). Отсюда следует, что добавочные члены не нарушают совместности (58) и (57), и, следовательно, условия (98) и (57) совместны.

Наш метод введения взаимодействия в теорию не был релятивистским, так как энергия взаимодействия (90) содержит динамические переменные, относящиеся к данному моменту времени в некоторой лоренцевой системе. Поэтому возникает вопрос, является ли теория со взаимодействием релятивистской. Уравнения поля, именно (98) и (95), очевидно, релятивистские, равно как и дополнительные условия (54). Остается невыясненным, являются ли релятивистски инвариантными квантовые условия.

Нам известны условия, связывающие все динамические переменные  $A_{\mu x}$ ,  $B_{\mu x}$ ,  $\psi_{ax}$ ,  $\bar{\psi}_{ax}$  в данный момент времени  $x_0$ . Как было упомянуто ранее, мы не можем установить общие

квантовые условия, связывающие динамические переменные в двух произвольных точках пространства-времени, так как взаимодействие делает вычисления слишком сложными. Поэтому мы совершим бесконечно малое преобразование Лоренца и найдем квантовые условия в данный момент времени в новой координатной системе. Если можно будет установить инвариантность квантовых условий относительно бесконечно малых преобразований Лоренца, то отсюда будет следовать инвариантность и относительно конечных преобразований Лоренца.

Пусть  $x_0^*$  будет время в новой системе отсчета. Оно связано с координатами в исходной системе отсчета соотношением

$$x_0^* = x_0 + \varepsilon v_r x_r, \quad (101)$$

где  $\varepsilon$  — бесконечно малая, а  $v_r$  — трехмерный вектор, так что  $\varepsilon v_r$  представляет собой относительную скорость двух систем отсчета. Будем пренебрегать членами порядка  $\varepsilon^2$ .

Величина  $k$ , описывающая поле, взятая в точке  $x$  и в момент времени  $x_0^*$ , имеет в новой системе координат значение

$$\begin{aligned} k(x, x_0^*) &= k(x, x_0) + (x_0^* - x_0) \frac{\partial k_x}{\partial x_0} = \\ &= k(x, x_0) + \varepsilon v_r x_r [k_x, H]. \end{aligned} \quad (102)$$

СП этой величины с другой подобной величиной  $\lambda(x', x_0^*)$ , описывающей поле, равна

$$\begin{aligned} [k(x, x_0^*), \lambda(x', x_0^*)] &= \\ &= [(k(x, x_0) + \varepsilon v_r x_r [k_x, H]), (\lambda(x', x_0) + \varepsilon v_{r'} x'_{r'} [\lambda_{x'}, H])] = \\ &= [k(x, x_0), \lambda(x', x_0)] + \varepsilon v_s x'_s [k_x, [\lambda_{x'}, H]] + \\ &\quad + \varepsilon v_r x_r [[k_x, H], \lambda_{x'}] = [k(x, x_0), \lambda(x', x_0)] + \\ &\quad + \varepsilon v_r (x'_r - x_r) [k_x, [\lambda_{x'}, H]] + \varepsilon v_r x_r [[k_x, \lambda_{x'}], H]. \end{aligned} \quad (103)$$

Если  $k$  и  $\lambda$  представляют собой переменные типа  $\psi$  или  $\bar{\psi}$ , то нас интересует не СП, а антикоммутатор. Используя обозначение (69) для антикоммутатора, имеем

$$\begin{aligned} [k(x, x_0^*), \lambda(x', x_0^*)]_+ &= \\ &= [k(x, x_0), \lambda(x', x_0)]_+ + \varepsilon v_r x'_r [k_x, [\lambda_{x'}, H]]_+ + \\ &\quad + \varepsilon v_r x_r [[k_x, H], \lambda_{x'}]_+ = [k(x, x_0), \lambda(x', x_0)]_+ + \\ &\quad + \varepsilon v_r (x'_r - x_r) [k_x, [\lambda_{x'}, H]]_+ + \varepsilon v_r x_r [[k_x, \lambda_{x'}]_+, H]. \end{aligned} \quad (104)$$



Если  $k$  и  $\lambda$  представляют собой любую пару из числа основных переменных  $A_\mu, B_\mu, \psi_a, \bar{\psi}_a$ , то СП  $[k_x, \lambda_x]$ , или соответственно антикоммутатор  $[k_x, \lambda_x]_\pm$ , является числом, так что последний член в (103) или (104) исчезает. Остается выражение

$$[k(x, x_0^*), \lambda(x', x_0^*)]_\pm = [k(x, x_0), \lambda(x', x_0)]_\pm + \\ + \varepsilon v_r(x'_r - x_r)[k_x[\lambda_{x'}, (H_P + H_F)]]_\pm + \\ + \varepsilon v_r(x_r - x'_r)[k_x, [\lambda_{x'}, H_Q]]_\pm, \quad (105)$$

где  $\pm$  означает СП или антикоммутатор, смотря по обстоятельствам. Из выражения (90) для  $H_Q$  видно, что выражение  $[\lambda_{x'}, H_Q]$  может содержать лишь динамические переменные  $A_{\mu x'}, \psi_{ax'}, \bar{\psi}_{ax'}$  и не может содержать их производных. Следовательно, выражение  $[k_x, [\lambda_{x'}, H_Q]]_\pm$ , если только оно не обращается в нуль, будет пропорционально  $\delta(x - x')$  и не будет содержать членов с производными от  $\delta(x - x')$ . Следовательно, последний член в (105) равен нулю. Можно, следовательно, заключить, что выражение  $[k(x, x_0^*), \lambda(x', x_0^*)]_\pm$  имеет то же самое значение, что и в отсутствие взаимодействия, и поэтому, как вытекает из прежних вычислений, оно является релятивистски инвариантным.

Следует отметить, что против вышеприведенного доказательства возможно следующее возражение. В нескольких местах мы вычисляли различные выражения, расположенные по степеням  $\varepsilon$ , и пренебрегали величинами порядка  $\varepsilon^2$ . Эта процедура не может быть, однако, применена для вычисления выражений  $[k(x), \lambda(x')]_\pm$ , если точки  $x$  и  $x'$  в пространстве-времени лежат близко друг к другу, так что разность  $x_\mu - x'_\mu$  будет порядка  $\varepsilon$ . В самом деле, результат расчета должен быть функцией от  $(x_\mu - x'_\mu)$ , имеющей особенность, когда четырехмерный вектор  $x - x'$  лежит на световом конусе, а такую функцию, разумеется, нельзя разлагать в степенной ряд по  $(x_\mu - x'_\mu)$ .

Для того чтобы сделать доказательство убедительным, нужно переформулировать его так, чтобы избежать использования дельта-функций. Вместо вычисления  $[k(x, x_0^*), \lambda(x', x_0^*)]_\pm$  следует вычислять выражение

$$\left[ \int a_x k(x, x_0^*) d^3x, \int b_{x'} \lambda(x', x_0^*) d^3x' \right]_\pm, \quad (106)$$

где  $a_x$  и  $b_x$  — две произвольные непрерывные функции от  $x_1, x_2, x_3$ . Тогда все величины, которые подлежат разложению

по степеням  $\varepsilon$ , будут изменяться непрерывно при непрерывном изменении направления оси времени, и разложения будут оправданы. Уравнения, которые теперь получатся, будут те же, что и в прежнем доказательстве, но умноженные на  $a_x b_x, d^3x d^3x'$  и проинтегрированные. Мы приходим к прежнему заключению, что СП или антикоммутаторы имеют те же значения, что и в отсутствие взаимодействия.

Причина, по которой взаимодействие не изменяет перестановочных соотношений, состоит, очевидно, в том, что оно имеет очень простой вид, а именно, оно содержит только динамические переменные, но не содержит их производных. СП и антикоммутаторы имеют те же значения, что и в отсутствие взаимодействия, если только они относятся к значениям перемещенных в таких двух точках пространства-времени, которые для некоторого наблюдателя являются одновременными. Это означает, что каждая из двух точек должна лежать вне светового конуса другой и может приближаться к ней только вдоль пути, лежащего вне этого светового конуса.

### § 80. Физические переменные

Кет-вектор  $|P\rangle$ , представляющий физическое состояние, должен удовлетворять дополнительным условиям

$$(B_0 + A_r')|P\rangle = 0, \quad (\text{div } \mathcal{E} - 4\pi j_0)|P\rangle = 0. \quad (107)$$

Динамическая переменная является физической, если в результате ее умножения на любой вектор, удовлетворяющий этим условиям, получится другой кет, удовлетворяющий тем же условиям. Следовательно, динамическая переменная должна коммутировать с величинами

$$B_0 + A_r', \quad \text{div } \mathcal{E} - 4\pi j_0. \quad (108)$$

Посмотрим, какие динамические переменные из числа наиболее простых обладают этим свойством.

Переменные поперечного поля  $\mathcal{A}_r, \mathcal{B}_r$ , очевидно, коммутируют с величинами (108) и являются физическими. Переменная  $\psi_a$  коммутирует с первой из величин (108), но не коммутирует со второй, и поэтому не является физической. Однако можно вместо  $\psi_a$  ввести величину, которая является физической. Произведем с этой целью некоторые выкладки.

Так, мы имеем

$$\begin{aligned} i\hbar [\psi_{ax}, (\bar{\psi}_{bx'} \cdot \psi_{bx'})] &= (\psi_{ax} \bar{\psi}_{bx'} + \bar{\psi}_{bx'} \psi_{ax}) \psi_{bx'} = \\ &= \delta_{ab} \delta(x - x') \psi_{bx'} = \psi_{ax} \delta(x - x'). \end{aligned}$$

Отсюда следует соотношение

$$[\psi_{ax}, j_{0x'}] = \frac{ie}{\hbar} \psi_{ax} \delta(x - x'). \quad (109)$$

Далее, из соотношения (42) вытекает

$$[e^{ieV_{x/\hbar}}, \operatorname{div} \mathfrak{E}_{x'}] = \frac{4\pi ie}{\hbar} e^{ieV_{x/\hbar}} \delta(x - x').$$

Следовательно, имеем

$$\begin{aligned} |e^{ieV_{x/\hbar}} \psi_{ax}, (\operatorname{div} \mathfrak{E}_{x'} - 4\pi j_{0x'})| &= \\ &= [e^{ieV_{x/\hbar}}, \operatorname{div} \mathfrak{E}_{x'}] \psi_{ax} - 4\pi e^{ieV_{x/\hbar}} [\psi_{ax}, j_{0x'}] = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, если мы положим

$$\psi_{ax}^* = e^{ieV_{x/\hbar}} \psi_{ax}, \quad (110)$$

то величина  $\psi_{ax}^*$  будет коммутировать с обоими выражениями (108), и поэтому будет физической. Подобно этому и величина  $\bar{\psi}_{ax}^*$  также будет физической. Переменные  $\mathcal{A}_r$ ,  $\mathcal{B}$ ,  $\psi_a^*$ ,  $\bar{\psi}_a^*$  являются единственными независимыми физическими переменными, не считая самих величин (108). В силу соотношений

$$j_0 = -\frac{1}{2} e(\bar{\psi}^{*+} \psi^* - \psi^{*+} \bar{\psi}^*); \quad j_r = -e \bar{\psi}^{*+} \alpha_r \psi^* \quad (111)$$

плотность заряда и плотность тока являются физическими. Легко также видеть, что  $\mathfrak{E}$  и  $\mathfrak{H}$  являются физическими, так же, как и в случае отсутствия электронов и позитронов. Физическими переменными являются все те, на которые не влияет существующий в теории Максвелла произвол в выборе потенциалов.

Оператор  $\psi_{ax}$  описывает рождение позитрона или аннигиляцию электрона в точке  $x$ . Посмотрим, каков физический смысл оператора  $\psi_{ax}^*$ . Из (44) имеем

$$i\hbar [e^{ieV_{x/\hbar}}, \mathfrak{E}_{rx'}] = ee^{ieV_{x/\hbar}} (x_r - x'_r) |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-3}$$

и, значит,

$$i\hbar [\psi_{ax}^*, \mathcal{E}_{rx'}] = e\psi_{ax}^*(x_r - x'_r) |x - x'|^{-3},$$

или

$$\mathcal{E}_{rx'} \psi_{ax}^* = \psi_{ax}^* \left\{ \mathcal{E}_{rx'} + \frac{e(x'_r - x_r)}{|x' - x|^3} \right\}. \quad (112)$$

Возьмем состояние  $|P\rangle$ , в котором  $\mathcal{E}_r$  в некоторой точке  $x'$  имеет численное значение  $c_r$ , так что будет

$$\mathcal{E}_{rx'} |P\rangle = c_r |P\rangle.$$

Тогда из (112) следует

$$\mathcal{E}_{rx'} \psi_{ax}^* |P\rangle = \{c_r + e(x'_r - x_r) |x' - x|^{-3}\} \psi_{ax}^* |P\rangle,$$

так что в состоянии, описываемом вектором  $\psi_{ax}^* |P\rangle$ , величина  $\mathcal{E}_r$  в точке  $x'$  имеет численное значение

$$c_r + e(x'_r - x_r) |x' - x|^{-3}.$$

Это означает, что оператор  $\psi_{ax}^*$ , кроме рождения позитрона или аннигиляции электрона в точке  $x$ , увеличивает электрическое поле в точке  $x'$  на величину  $e(x'_r - x_r) |x' - x|^{-3}$ , которая в точности равна классическому кулоновскому полю в точке  $x'$ , от позитрона с зарядом  $e$ , расположенного в точке  $x$ . Итак, оператор  $\psi_{ax}^*$  создает позитрон в точке  $x$  вместе со своим кулоновским полем или уничтожает электрон в точке  $x$  вместе с его кулоновским полем.

Для электронов и позитронов, взаимодействующих с электромагнитным полем, физическим процессам рождения и аннигиляции позитронов и электронов соответствуют величины  $\psi^*$ ,  $\bar{\psi}^*$ , а не  $\psi$ ,  $\bar{\psi}$ ; действительно, эти процессы должны всегда сопровождаться соответствующим кулоновским изменением в электрическом поле вокруг точки, где рождается или аннигилируется частица. Легко видеть, что переменные  $\psi_{ax}^*$ ,  $\bar{\psi}_{ax}^*$  удовлетворяют тем же соотношениям антикоммутации (70), что и переменные, не отмеченные звездочкой. После перехода к импульсному представлению будут важны не величины  $\psi_p$ , определяемые формулами (67), и не являющиеся физическими, а физические переменные  $\psi_p^*$ , определяемые соотношениями

$$\psi_x^* = \hbar^{-3/2} \int e^{i(xp)/\hbar} \psi_p^* d^3p, \quad \psi_p^* = \hbar^{-3/2} \int e^{-i(xp)/\hbar} \psi_x^* d^3x. \quad (113)$$

Нужно также заменить формулы (68) выражениями

$$\xi_p^* = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \psi_p^*; \quad \zeta_p^* = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(p^2 + m^2)^{1/2}} \right\} \psi_p^*$$

и принять следующее условие: оператор  $\xi_p^*$  представляет аннигиляцию электрона с импульсом  $\mathbf{p}$ ; оператор  $\xi_p^*$  — рождение электрона с импульсом  $\mathbf{p}$ ; оператор  $\zeta_p^*$  — рождение позитрона с импульсом  $-\mathbf{p}$ ; оператор  $\bar{\xi}_p^*$  — аннигиляцию позитрона с импульсом  $-\mathbf{p}$ . Все переменные  $\xi_p^*$ ,  $\bar{\xi}_p^*$ ,  $\zeta_p^*$ ,  $\bar{\zeta}_p^*$ ,  $\psi_p^*$ ,  $\bar{\psi}_p^*$  удовлетворяют тем же соотношениям антикоммутации, что и величины, не отмеченные звездочкой.

Оператор Гамильтона может быть выражен целиком через физические переменные. Замечая, что

$$\psi^{*r} = e^{ieV/\hbar} \left( \psi^r + \frac{ie}{\hbar} V^r \psi \right),$$

имеем

$$\begin{aligned} H_P + H_Q &= \int \{ \bar{\psi}^+ \alpha_r [-i\hbar \psi^r - e(\mathcal{A}^r - V^r) \psi] + \bar{\psi}^+ \alpha_m m \psi + A^0 j_0 \} d^3x = \\ &= \int \{ \bar{\psi}^{*+} \alpha_r (-i\hbar \psi^{*r} - e\mathcal{A}^r \psi^*) + \bar{\psi}^{*+} \alpha_m m \psi^* + A^0 j_0 \} d^3x. \end{aligned}$$

Последний член в подынтегральном выражении следует объединить с  $H_{FL}$ . Из (49) и (57) с помощью (99) выводим

$$\begin{aligned} H_{FL} &\approx - (8\pi)^{-1} \int (U - A_0) (U + A_0) r^r d^3x \approx \\ &\approx \frac{1}{2} \int (U - A_0) j_0 d^3x. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$H_{FL} + \int A^0 j_0 d^3x \approx \frac{1}{2} \int (U + A_0) j_0 d^3x.$$

Интегрируя (99) с помощью формулы (77) § 38, будем иметь

$$A_{0x} + U_x \approx \int \frac{j_{0x'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x'$$

и, следовательно,

$$H_{FL} + \int A^0 j_0 d^3x \approx \frac{1}{2} \int \int \frac{j_{0x} j_{0x'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x d^3x',$$

Таким образом, получаем

$$H \approx H^*,$$

где

$$H^* = \int \{ \bar{\psi}^{*+} \alpha_r (-i\hbar \psi^{*r} - e \mathcal{A}^r \psi^*) + \bar{\psi}^{*+} \alpha_m m \psi^* \} d^3x + \\ + H_{FT} + \frac{1}{2} \int \int \frac{j_{0x} j_{0x'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x d^3x'. \quad (114)$$

В уравнении Шредингера для кет-вектора  $|P\rangle$ , представляющего физическое состояние, можно пользоваться оператором  $H^*$  вместо  $H$ . В самом деле, такой вектор удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{d}{dx_0} |P\rangle = H |P\rangle = H^* |P\rangle. \quad (115)$$

Оператор  $H^*$  содержит только физические переменные, тогда как переменные продольного поля в него не входят. Вместо переменных продольного поля мы имеем последний член в (114), который как раз равняется кулоновской энергии взаимодействия всех имеющихся зарядов. Появление такого члена в релятивистской теории несколько странно, так как он представляет собой энергию, связанную с мгновенным взаимодействием. Он появляется в результате преобразований, далеко уведящих нас от гейзенберговской формы теории, в которой релятивистская инвариантность очевидна.

Можно было бы построить представление, взяв в качестве стандартного вектора произведение двух стандартных векторов: определяемого формулами (61) и (62) кет-вектора  $|0_F\rangle$  для электромагнитного поля и определяемого формулой (74) кет-вектора  $|0_P\rangle$  для электронов и позитронов. Это представление, однако, не будет удобным, так как его стандартный вектор не удовлетворяет второму из дополнительных условий (107).

Более удобное представление получится, если взять другой стандартный кет-вектор  $|0_Q\rangle$ , удовлетворяющий соотношениям

$$(B_0 + A_r) |0_Q\rangle = 0, \quad (\text{div } \mathcal{E} - 4\pi j_0) |0_Q\rangle = 0, \quad (116)$$

$$\mathcal{A}_{rk} |0_Q\rangle = 0, \quad \xi_{ap}^* |0_Q\rangle = 0, \quad \xi_{ap} |0_Q\rangle = 0. \quad (117)$$

Эти условия совместны, поскольку все операторы, действующие на кет-вектор  $|0_Q\rangle$ , коммутируют или антикоммутируют друг с другом. Кроме того, число таких условий достаточно для определения вектора  $|0_Q\rangle$  с точностью до численного множителя, так как это число равно числу условий,

налагаемых на  $|0_F\rangle |0_P\rangle$ . Соотношения (116) показывают, что вектор  $|0_Q\rangle$  удовлетворяет дополнительным условиям и, следовательно, представляет физическое состояние. Соотношения же (117) показывают, что  $|0_Q\rangle$  представляет состояние, в котором фотоны, электроны и позитроны отсутствуют.

Любой кет-вектор  $|P\rangle$ , который удовлетворяет дополнительным условиям (107) и, следовательно, представляет физическое состояние, может быть выражен как результат умножения некоторой физической переменной на  $|0_Q\rangle$ . Единственными независимыми физическими переменными, которые дают отличный от нуля результат при действии на вектор  $|0_Q\rangle$ , являются  $\mathcal{A}_{rk}, \xi_{ap}^*, \zeta_{ap}^*$ . Следовательно, имеем

$$|P\rangle = \Psi(\mathcal{A}_{rk}, \xi_{ap}^*, \zeta_{ap}^*) |0_Q\rangle. \quad (118)$$

Таким образом, вектор  $|P\rangle$  представляется волновым функционалом  $\Psi$ , содержащим переменные  $\mathcal{A}_{rk}, \xi_{ap}^*, \zeta_{ap}^*$ . Это есть степенной ряд по указанным переменным, причем различные члены соответствуют наличию различных чисел фотонов, электронов и позитронов вместе с кулоновским полем вокруг электронов и позитронов.

Если пользоваться представлением (118) и оператором Гамильтона  $H^*$ , можно не принимать во внимание условий (116), так как они не играют роли при решении уравнений Шредингера (115). При этом продольные переменные в теории больше не появляются.

## § 81. Трудности теории

Стандартный кет-вектор  $|0_Q\rangle$  представляет состояние, в котором нет ни фотонов, ни электронов, ни позитронов. Можно было бы думать, что это состояние является совершенным вакуумом, но этого не может быть, так как оно не является стационарным. Чтобы оно было стационарным, должно было бы выполняться равенство  $H^*|0_Q\rangle = C|0_Q\rangle$ , где  $C$  есть число. Но оператор  $H^*$  содержит члены

$$-e \int \bar{\psi}^{*+} \alpha_r \mathcal{A}^r \psi^* d^3x + \frac{1}{2} \iint \frac{j_{0x} j_{0x'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x d^3x', \quad (119)$$

которые при действии на  $|0_Q\rangle$  не дают числовых множителей и поэтому нарушают стационарный характер  $|0_Q\rangle$ .

Эти члены можно было бы рассматривать в соответствии с теорией § 44 как возмущение, благодаря которому возникает возможность перехода из состояния  $0_Q$  в другое состояние. Разложение в интеграл Фурье первого члена из (119) содержит часть

$$-e(\alpha_r)_{ab} \iint \mathcal{A}_k \bar{\xi}_{ap}^* \xi_{sb}^*, p+k \hbar d^3k d^3p, \quad (120)$$

вызывающую переходы с испусканием фотона и одновременным образованием пары электрон — позитрон. Спустя короткий промежуток времени вероятность перехода будет пропорциональна квадрату длины вектора, получаемого при умножении (120) на исходный вектор  $|0_Q\rangle$ . Результат умножения равен

$$e^2 (\bar{\alpha}_r)_{ab} (\alpha_s)_{cd} \iiint \langle 0_Q | \bar{\xi}_{a, p+k \hbar}^* \xi_{bp}^* \mathcal{A}_k^r \mathcal{A}_{k'}^s \bar{\xi}_{cp}^* \xi_{d, p'+k' \hbar}^* | 0_Q \rangle \times \\ \times d^3k d^3p d^3k' d^3p' = e^2 (\bar{\alpha}_r)_{ab} (\alpha_s)_{cd} \iiint \langle 0_Q | i\hbar [\mathcal{A}_k^r, \mathcal{A}_{k'}^s] \times \\ \times [\xi_{bp}^*, \bar{\xi}_{cp'}^*] + [\bar{\xi}_{a, p+k \hbar}^*, \xi_{d, p'+k' \hbar}^*] | 0_Q \rangle d^3k d^3p d^3k' d^3p'.$$

Пользуясь выражениями для СП и антикоммутаторов (4), (16), (72), (73), получим подынтегральное выражение, которое для больших  $k$  и  $k'$  будет зависеть от переменных  $k$ ,  $k'$  по закону  $|k|^{-1} \delta(k - k')$ . Это дает расходящийся интеграл, так что вероятность перехода бесконечна.

Разложение в интеграл Фурье второго члена (119) содержит выражения типа  $\bar{\xi}_{sp}^* \xi_{sp}^* \xi_{sp+p}^* \xi_{sp-p}^*$ , соответствующие одновременному образованию двух электронно-позитронных пар. Можно определить, как и выше, вероятность перехода, и она опять оказывается бесконечной.

Из этих вычислений можно заключить, что состояние  $0_Q$  не является даже приближенно стационарным. Более серьезной трудностью является то обстоятельство, что метод возмущений нельзя считать применимым для решения волнового уравнения в том случае, когда вероятности переходов, к которым он приводит, оказываются бесконечными, как это всегда бывает в квантовой электродинамике независимо от исходного состояния. Но мы не знаем метода, который можно было бы использовать вместо этого. Следовательно, решение волнового уравнения квантовой электродинамики остается неизвестно.

Источником трудностей являются флуктуации плотности моря электронов с отрицательной энергией. Эти флук-



туации возникают уже в теории электронов и позитронов в отсутствие электромагнитного поля. Плотность всех электронов как с положительной, так и с отрицательной энергией равна  $\rho_x = \bar{\psi}_x^+ \psi_x = (\bar{\xi}_x^+ + \bar{\zeta}_x^+) (\xi_x + \zeta_x)$ .

Следовательно, согласно (74) будем иметь

$$\rho_x |0_P\rangle = \bar{\xi}_x^+ \zeta_x |0_P\rangle + (\bar{\zeta}_x^+ \zeta_x + \bar{\xi}_x^+ \bar{\zeta}_x) |0_P\rangle. \quad (121)$$

Соотношения антикоммутации (73) для  $\xi$  и  $\bar{\zeta}$  приводят к тому, что выражение

$$\bar{\xi}_x^+ \zeta_x + \bar{\zeta}_x^+ \bar{\xi}_x \quad (122)$$

оказывается числом, хотя и бесконечным, так что второй член в правой части (121) равен вектору  $|0_P\rangle$ , умноженному на числовой множитель. Первый же член определенно не сводится к кратному  $|0_P\rangle$ , так что  $|0_P\rangle$  не является собственным вектором  $\rho_x$ . Значит, плотность распределения в вакууме электронов с отрицательной энергией не является постоянной, но испытывает непрерывные флуктуации.

Физический смысл имеет плотность электронов с положительной энергией минус плотность позитронов, так как эти величины определяют плотность заряда, используемую в уравнении Максвелла (58) § 73. Согласно идее § 73, для того чтобы получить эту величину, имеющую физический смысл, нужно вычесть из плотности всех электронов плотность вакуумного распределения. В точной квантовой электродинамической теории вычисляемая величина должна была бы быть вполне определенным оператором, который можно было бы ввести в наши уравнения. Лучшее, что мы можем сделать, — взять в качестве такого оператора постоянную часть (122) плотности вакуумного распределения и не вычитать флуктуирующую часть. Это дает

$$j_{0x} = -e \{ \bar{\psi}_x^+ \psi_x - (\bar{\xi}_x^+ \zeta_x + \bar{\zeta}_x^+ \bar{\xi}_x) \}. \quad (123)$$

С помощью соотношения  $\bar{\xi}_x^+ \xi_x + \bar{\xi}_x^+ \bar{\xi}_x = \bar{\xi}_x^+ \zeta_x + \bar{\zeta}_x^+ \bar{\xi}_x$  (которое получается из перестановочных соотношений (72) и (73), если положить в них  $a = b$  и просуммировать) легко видеть, что величина (123) согласуется с нашим прежним выражением (77) для  $j_0$ . Но поскольку флуктуирующая часть плотности вакуумного распределения не была вычтена, она остается в плотности заряда, действующей на вакуумный вектор, т. е.  $j_{0x} |0_P\rangle = -e \bar{\xi}_x^+ \zeta_x |0_P\rangle$ .

Таким образом, плотность заряда в вакууме не равна нулю. Мы получили явно парадоксальный результат: хотя состояние вакуума определено как состояние без позитронов и электронов, все же оно имеет отличную от нуля плотность заряда. Этот результат является прямым следствием того обстоятельства, что нам не удалось вычесть флуктуации фона электронов с отрицательной энергией даже предположив, что нет взаимодействия с электромагнитным полем.

Имеется некоторая трудность и в связи с постоянной частью (122) плотности вакуумного распределения. Из соображений симметрии можно ожидать, что постоянная часть тока, вызванного движением вакуумного распределения электронов, должна отсутствовать, так что мы имеем плотность заряда в отсутствие тока. Но это обстоятельство дало бы нам выделенную лоренцеву систему отсчета, что, однако, не может быть в релятивистской теории.

Выход из этого противоречия состоит в учете того обстоятельства, что ток, вызванный движением вакуумного распределения электронов, в действительности представляет собой разность двух бесконечных величин и поэтому не имеет однозначного определения. С помощью предельного перехода, относящегося к определенной лоренцевой системе отсчета, можно подсчитать постоянную часть этого тока и получить для нее некоторое определенное значение; но этому значению нельзя отдавать предпочтение перед другими. Произвол в величине постоянной части тока не является серьезной трудностью теории, так как его можно избежать, введя иное определение  $j_r$ , а именно, положив

$$j_{rx} = -\frac{1}{2} e (\bar{\psi}_x^+ \alpha_r \psi_x - \psi_x^+ \alpha_r^+ \bar{\psi}_x)$$

вместо (78). Это определение приводит величину  $j_{rx}$  к тому же виду, что и выражение (77) для  $j_0$  и позволяет написать релятивистски симметричное уравнение

$$j_\mu = -\frac{1}{2} e (\bar{\psi}^+ \alpha_\mu \psi - \psi^+ \alpha_\mu^+ \bar{\psi}). \quad (124)$$

Трудность с флуктуациями является более серьезной. Если ввести взаимодействие с электромагнитным полем, то флуктуирующая плотность заряда в вакууме создаст флуктуирующее поле согласно уравнению Максвелла (100), а это поле будет оказывать обратное действие на фон электронов с отрицательной энергией, вызывая рождение электроно-

позитронных пар. Попытки рассчитать это обратное действие приводят к появлению расходящихся интегралов, что делает невозможным решение волнового уравнения с учетом взаимодействия.

Бесконечности появлялись в теории и ранее, но они не вызывали серьезных затруднений, так как они не играли в уравнениях важной роли; их можно было избежать, изменив подходящим образом определение соответствующих величин. Так, определяя  $H_{FT}$  выражением (47), мы имели бесконечную нулевую энергию поперечного электромагнитного поля, но ее можно было устранить, используя (65). Далее, при определении  $H_p'$ , согласно (80), мы имели бесконечную нулевую энергию электронов и позитронов и бесконечный член, входящий в явном виде в выражение (82) для  $H_p$ . Эти бесконечности можно было устранить, принимая для  $H_p$  выражение (81). Появилась также бесконечная постоянная часть (122) вакуумной плотности электронов, но ее можно было исключить из теории, пользуясь для  $j_\mu$  формулой (124). Но не существует простого способа видоизменить теорию так, чтобы можно было избежать флуктуационных бесконечностей.

Удалось достичь успеха в выработке некоторых правил, дающих возможность самосогласованным образом отбрасывать бесконечности, вызванные флуктуациями. Таким путем была получена более или менее удовлетворительно действующая теория, которая позволяет выполнять вычисления величин, допускающих сравнение с экспериментом. Было найдено хорошее согласие теории с экспериментом, свидетельствующее о некоторой законности предложенных правил. Но эти правила применимы только к частным задачам, обычно задачам столкновений, и они плохо согласуются с логическими основами квантовой механики. Их нельзя поэтому рассматривать как удовлетворительное решение трудностей.

Нам представляется, что мы следовали по пути логического развития идей квантовой механики в их современном понимании настолько далеко, насколько это возможно. Встреченные трудности ввиду их глубокого характера могут быть устранены лишь радикальным изменением основ теории, вероятно, столь же радикальным, как и переход от теории боровских орбит к современной квантовой механике.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### О КАНОНИЧЕСКОМ ПРЕОБРАЗОВАНИИ В КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ\*)

(В. А. Фок)

В § 26 книги Дирака формулируется следующее утверждение.

*Для систем, имеющих классический аналог, унитарное преобразование операторов представляет аналогию с касательным преобразованием классической механики. Мы проследим здесь эту аналогию несколько подробнее.*

Пусть  $q_1, q_2, \dots, q_n$  и  $p_1, p_2, \dots, p_n$  — первоначальные координаты и импульсы системы, а  $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$  и  $P_1, P_2, \dots, P_n$  — преобразованные координаты и импульсы. Мы рассмотрим случай, когда функция преобразования  $S$  зависит от старых и новых координат

$$S = S(q_1, \dots, q_n; Q_1, \dots, Q_n). \quad (1)$$

Касательное преобразование определяется соотношением между дифференциалами

$$\sum_{r=1}^n p_r dq_r - \sum_{r=1}^n P_r dQ_r = dS, \quad (2)$$

из которого следует

$$p_r = \frac{\partial S}{\partial q_r}; \quad P_r = - \frac{\partial S}{\partial Q_r}. \quad (3)$$

Выражения для величин  $q, p$  через величины  $Q, P$  и обратные выражения получаются решением уравнений (3). Это решение всегда возможно, так как определитель

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_r \partial Q_s} = \text{Det} \frac{\partial^2 S}{\partial q_r \partial Q_s} \neq 0 \quad (4)$$

предполагается отличным от нуля.

В квантовой механике такому касательному преобразованию соответствует унитарное преобразование от представления, в котором «диагональными» являются величины  $q$ , к представлению, в котором «диагональными» являются величины  $Q$ . Это унитарное преобразование имеет следующий вид: обозначим для краткости \*\*) через  $\psi_Q(q)$  общие

\*) См. Фок В. А., Вестник ЛГУ — 1959, № 16, с. 67.

\*\*) Совокупность переменных  $q_1, \dots, q_n$  мы будем часто обозначать одной буквой  $q$ ; аналогичный смысл будут иметь обозначения  $p, Q, P$ .

собственные функции операторов  $Q_1, \dots, Q_n$ , выраженные в переменных  $q_1, \dots, q_n$ .

Пусть  $F$  есть преобразуемый оператор. Тогда ядро (или матрица) преобразованного оператора  $F^*$  будет иметь вид

$$\langle Q' | F^* | Q \rangle = \int \bar{\Psi}_{Q'}(q) F \Psi_Q(q) dq, \quad (5)$$

где под  $dq$  разумеется произведение дифференциалов

$$dq = dq_1 \dots dq_n. \quad (6)$$

В обозначениях Дирака

$$\Psi_Q(q) = \langle q | Q \rangle \quad (7)$$

и формула (5) напишется

$$\langle Q' | F^* | Q \rangle = \int \langle Q' | q \rangle F \langle q | Q \rangle dq. \quad (8)$$

Собственную функцию  $\Psi_Q(q)$  можно рассматривать как ядро  $\langle q | \bar{U} | Q \rangle$  унитарного оператора  $\bar{U} = U^{-1}$  и писать формулу (8) в виде

$$F^* = U F U^{-1}. \quad (9)$$

При  $F = 1$  формула (5) приводится к условию ортогональности, причем слева должно получиться ядро единичного оператора в переменных  $Q$ , т. е.

$$\langle Q' | 1 | Q \rangle = \delta_0(Q - Q') \equiv \delta(Q_1 - Q'_1) \dots \delta(Q_n - Q'_n), \quad (10)$$

где  $\delta$  есть дельта-функция Дирака.

В полуклассическом приближении мы можем взять в качестве  $\Psi_Q(q)$  выражение

$$\Psi_Q(q) = c \sqrt{\left| \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial Q} \right|} e^{i S / \hbar}. \quad (11)$$

Постоянная  $c$  равна

$$c = (2\pi\hbar)^{-n/2}. \quad (12)$$

Проверим, что эти функции приближенно удовлетворяют условию ортогональности. Подстановка выражений (11) в интеграл (5) при  $F = 1$  дает под интегралом быстропеременный показательный множитель  $\exp[i(S - S')/\hbar]$ , где  $S'$  получается из  $S$  заменой  $Q$  на  $Q'$ . Этот множитель перестает быть быстропеременным только если  $Q'$  близко к  $Q$ . Только при таком условии интеграл будет заметно отличен от нуля. Поэтому мы можем заменить в показателе разность  $S - S'$  выражением

$$S - S' = - \sum_{r=1}^n (Q'_r - Q_r) \frac{\partial S}{\partial Q_r} \quad (13)$$

или

$$S - S' = \sum_{r=1}^n (Q'_r - Q_r) P_r \quad (14)$$

где  $P_r$  имеет значение (3). Формулу (14) можно для краткости записать

в виде

$$S - S' = (Q' - Q) P. \quad (15)$$

Во всех множителях при показательной функции мы можем положить  $Q' = Q$ . Мы получим тогда

$$\int \bar{\Psi}_{Q'}(q) \Psi_Q(q) dq = c^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(Q' - Q)P} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial Q \partial q} \right| dq. \quad (16)$$

Но если  $P_r$  имеет значение (3), то определитель под интегралом в (16) есть якобиан преобразования от  $P$  к  $q$ , так что

$$\left| \frac{\partial^2 S}{\partial Q \partial q} \right| dq = dP_1 \dots dP_n \equiv dP. \quad (17)$$

Поэтому формулу (16) можно записать в виде

$$\int \bar{\Psi}_{Q'}(q) \Psi_Q(q) dq = c^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(Q' - Q)P} dP. \quad (18)$$

Но оставшийся интеграл (умноженный на  $c^2$ ) есть просто произведение дельта-функций (10). Отсюда окончательно

$$\int \bar{\Psi}_{Q'}(q) \Psi_Q(q) dq = \delta_0(Q - Q') \quad (19)$$

и, следовательно, условие ортогональности и нормировки выполняется.

Рассмотрим теперь матрицу для произвольного оператора  $F$ , выраженного через  $q_r$  и  $p_r = -i\hbar \partial/\partial q_r$ .

Пусть

$$F = F(q, p) = F(q, -i\hbar \partial/\partial q). \quad (20)$$

Результат действия такого оператора на функцию  $\exp(iS/\hbar)$  будет в рассматриваемом приближении равен

$$F\left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\right) e^{\frac{i}{\hbar}S} \cong e^{\frac{i}{\hbar}S} F\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right). \quad (21)$$

То же справедливо и по отношению к функции (11). Поэтому в формуле (5) мы можем разуметь под  $F$  не дифференциальный оператор, а функцию, стоящую в правой части (21). Полагая, как и раньше, в множителях при показательной функции  $Q' = Q$ , будем иметь

$$(Q' | F^* | Q) = c^2 \int F\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(S - S')} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial Q \partial q} \right| dq. \quad (22)$$

В качестве переменных интегрирования возьмем, как и в (18), величины  $P$ . Преобразуя к ним функцию  $F$ , будем иметь

$$F(q, p) = F(q(Q, P), p(Q, P)) = F^*(Q, P), \quad (23)$$

где под  $p$  и  $P$  разумеются классические выражения (3). Вследствие приближенного равенства (15) мы можем написать

$$(Q' | F^* | Q) = c^2 \int F^*(Q, P) e^{\frac{i}{\hbar}(Q' - Q)P} dP. \quad (24)$$

Чтобы вычислить этот интеграл, заметим, что умножение содержащейся

в нем показательной функции на  $P$  равносильно применению к ней оператора  $-ih \partial/\partial Q'$ . Поэтому

$$\int F^*(Q, P) e^{\frac{i}{\hbar}(Q' - Q)P} dP = \int F^*\left(Q, -ih \frac{\partial}{\partial Q'}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(Q' - Q)P} dP. \quad (25)$$

Вынося оператор  $F^*$  за знак интеграла и пользуясь результатами (18) и (19), получим

$$(Q' | F^* | Q) = F^*\left(Q, -ih \frac{\partial}{\partial Q'}\right) \delta_0(Q - Q'). \quad (26)$$

Здесь (как, впрочем, и в предыдущих формулах) можно было бы взять в качестве первого аргумента  $F^*$  величину  $Q'$ .

Так как результат применения оператора  $F^*$  к некоторой функции  $\Psi(Q)$  определяется формулой

$$F^*\Psi(Q) = \int (Q | F^* | Q') \Psi(Q') dQ', \quad (27)$$

то, пользуясь выражением (26), для элемента матрицы будем иметь

$$F^*\Psi(Q) = F^*\left(Q, -ih \frac{\partial}{\partial Q}\right) \Psi(Q). \quad (28)$$

Таков будет вид преобразованного оператора  $F^*$  (с точностью до членов, зависящих от порядка множителей в нем).

Наши вычисления можно резюмировать следующим образом. Применение приближенного равенства (21) позволило нам перейти от оператора  $F(q, -ih \partial/\partial q)$  к функции  $F(q, p)$ ; затем эта функция была выражена по классическим формулам для касательного преобразования через новые переменные  $Q, P$ ; от полученной новой функции  $F^*(Q, P)$  мы затем вновь перешли к оператору  $F^*(Q, -ih \partial/\partial Q)$ , когда применяли метод дифференцирования по параметру к вычислению интеграла.

Таким путем мы пришли к следующему результату. Пусть дан оператор

$$F = F(q, p); \quad p = -ih \frac{\partial}{\partial q}, \quad (29)$$

выраженный в переменных  $q$ . После унитарного преобразования к переменным  $Q$  оператор  $F$  переходит в  $F^*$ . Пусть оператор  $F^*$ , выраженный аналогично (29), имеет вид

$$F^* = F^*(Q, P); \quad P = -ih \partial/\partial Q. \quad (30)$$

Предположим, что собственные функции, при помощи которых совершается унитарное преобразование от  $q$  к  $Q$ , имеют в полуклассическом приближении вид (11), так что их фаза равна  $S(q, Q)/\hbar$ . Тогда вид функции  $F^*$  может быть получен из  $F$  с точностью до членов, зависящих от порядка множителей, путем простого алгебраического преобразования при помощи равенств

$$F(q, p) = F^*(Q, P), \quad p = \partial S/\partial q; \quad P = -\partial S/\partial Q, \quad (31)$$

где  $S$  есть функция, входящая в фазу унитарного преобразования. Последние формулы представляют касательное преобразование классической механики.

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Амплитуда вероятности 103  
 — — относительная 104  
 Аналогия классическая 117  
 Ансамбль Гиббса 177  
 Антикоммутативность 201  
 Антилинейность 39

Бозе статистика 278  
 Бозон 278  
 Борна — Инфельда электродинамика  
 459, 470—472  
 Бра-вектор 28, 35  
 — — стандартный 118

Вектор 28  
 — антисимметричный 276  
 — базисный 88  
 — длина 33  
 — симметричный 276  
 Весовая функция представления 95  
 Волновая функция 112, 152  
 Волновой пакет 164  
 Волны де Бройля 163  
 Вторичное квантование 303  
 — — фермионов 331

Гамильтона метод 415, 481  
 — оператор 156  
 Гамильтониан 155, 156, 414  
 — полный 417  
 Гамильтонов формализм 413  
 — — обобщенный 421  
 Гейзенберга картина 153  
 — представление 159  
 Гиббса ансамбль 177  
 Гильберта пространство 59

Действие 173  
 Дельта-функция 84  
 Динамическая переменная 27, 40, 41  
 — — вещественная 48  
 — — второго рода 421  
 — — гейзенберговская 154  
 — — наблюдаемая 55  
 — — первого рода 428  
 — — шредингеровская 154  
 — система 27  
 Дирака матрица 337  
 — представление 231  
 — уравнение 338

Дисперсионная формула Крамерса —  
 Гейзенберга 326  
 Дополнительное условие Ферми 375  
 Дырка 360

Зеемана эффект 222, 242  
 Зоммерфельда формула 356

Импульсное представление 133  
 Интеграл действия 411  
 — по путям 176

Канонические переменные 118  
 Картина движения гейзенберговская  
 153  
 — — шредингеровская 152  
 Касательное преобразование 144, 145,  
 404—407  
 Квантовые условия 117  
 — — основные 121  
 Кет-вектор 28, 29  
 — — стандартный 111  
 Классическая аналогия 117

Лагранжа функция 173, 411  
 Лагранжиан 411  
 Ланде формула 244

Магнитная аномалия спина 222  
 Магнитный момент электрона 348  
 Матрица 96  
 — обобщенная 98  
 — унитарная 143  
 — эрмитова 97, 98  
 Матричный элемент 96  
 Момент орбитальный 191  
 — спинный 191

Наблюдаемые 55  
 — коммутирующие 72  
 — —, полный набор 82  
 Несобственная функция 84  
 Нулевая энергия 307



**Оператор антисимметризирующий 327**

- вращения 191
- Гамильтона 156
- линейный 37
- — вещественный 42, 48
- — самосопряженный 42
- — сопряженный 41
- сдвига 136
- симметризирующий 297
- унитарный 143
- физический 376
- Орбитальный момент 191

**Паули принцип 279**

- Переменная динамическая — см. Динамическая переменная
- Перенормировки 471
- Перестановка 276
- Перестановочная функция электромагнитного поля 367
- — электрон-позитронов 387
- Перестановочные соотношения 117
- Планка постоянная 120
- Плотность вероятности 339
- Позитрон 359
- Полная система 55
- Поляризации состояние 15
- Правила отбора 213—220
- Представитель 77
- Представление 77
- взаимодействия 231
- гейзенберговское 159
- Дирака 231
- импульсное 133
- ортогональное 79
- симметричное 275
- фоковское 187
- шредингеровское 129
- Преобразования унитарные 143
- Принцип действия 173, 410
- неопределенности 135
- Паули 279
- суперпозиции 15, 27
- Промежуточные состояния 233
- Пространство векторов состояний 28, 59
- Гильберта 59

**Рассеяния коэффициент 250****Связи 422**

- вторичные 418
- второго рода 422
- первичные 413
- первого рода 422
- суперпозиционные 26
- Система атомная 23
- вырожденная 228

**Система динамическая 27**

- невырожденная 228
- Скобки Пуассона 118, 415
- — квантовые 120
- —, соотношения 427
- Слабое равенство 377
- Собственная энергия 237
- Собственные векторы 46
- значения 46
- Состояние 23, 24
- антисимметричное 276
- движения 24
- динамической системы 27
- квантовое 24
- нестационарное 249
- поглощения 249
- поляризации 15
- промежуточное 233
- симметричное 276
- стационарное 159, 264
- Спины электрона 200
- Суперпозиции принцип 15, 23, 27
- —, математическая формулировка 30
- Суперпозиция 15, 19, 21, 24, 26

**Унитарное преобразование 143**

- Уравнение Гамильтона — Якоби 168
- Дирака 338
- неразрывности 168, 177
- Шредингера, волновое 152
- Уравнения движения гамильтоновы 415
- —, гейзенберговская форма 154
- —, шредингеровская форма 150
- Условие дополнительное 375
- квантовое 117
- частот Бора 160

**Фазовое пространство 177**

- Фазовый множитель 36
- Фермионы 278
- Функция Гамильтона 155
- Лагранжа 173
- преобразования 106
- упорядоченная 176

**Электромагнитное поле 365 и д.**

- —, дополнительное условие 378
- —, оператор Гамильтона 366
- —, перестановочная функция 367—369
- —, поперечная часть 362
- —, продольная часть 362
- Элемент диагональный 96
- матричный 96

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора серии . . . . .	5
От редактора русского издания . . . . .	6
Из предисловия автора к русскому изданию . . . . .	8
Из предисловия к первому изданию . . . . .	9
<b>Глава I. Принцип суперпозиции . . . . .</b>	<b>11</b>
§ 1. Потребность в квантовой теории . . . . .	11
§ 2. Поляризация фотонов . . . . .	15
§ 3. Интерференция фотонов . . . . .	18
§ 4. Суперпозиция и индетерминизм . . . . .	21
§ 5. Математическая формулировка принципа . . . . .	27
§ 6. Векторы бра и кет . . . . .	32
<b>Глава II. Динамические переменные и наблюдаемые . . . . .</b>	<b>37</b>
§ 7. Линейные операторы . . . . .	37
§ 8. Соотношения сопряженности . . . . .	41
§ 9. Собственные значения и собственные векторы . . . . .	45
§ 10. Наблюдаемые . . . . .	52
§ 11. Функции наблюдаемых . . . . .	60
§ 12. Общее физическое толкование . . . . .	67
§ 13. Коммутативность и совместность . . . . .	71
<b>Глава III. Представления . . . . .</b>	<b>77</b>
§ 14. Базисные векторы . . . . .	77
§ 15. Дельта-функция . . . . .	84
§ 16. Свойства базисных векторов . . . . .	88
§ 17. Представление линейных операторов . . . . .	95
§ 18. Амплитуды вероятности . . . . .	102
§ 19. Теоремы о функциях наблюдаемых . . . . .	107
§ 20. Усовершенствование обозначений . . . . .	110
<b>Глава IV. Квантовые условия . . . . .</b>	<b>117</b>
§ 21. Скобки Пуассона . . . . .	117
§ 22. Шредингеровское представление . . . . .	123
§ 23. Импульсное представление . . . . .	130
§ 24. Принцип неопределенности Гейзенберга . . . . .	134
§ 25. Операторы сдвига . . . . .	136
§ 26. Унитарные преобразования . . . . .	141

<b>Глава V. Уравнения движения</b> . . . . .	148
§ 27. Шредингеровская форма уравнений движения . . . . .	148
§ 28. Гейзенберговская форма уравнений движения . . . . .	152
§ 29. Стационарные состояния . . . . .	158
§ 30. Свободная частица . . . . .	160
§ 31. Движение волнового пакета . . . . .	164
§ 32. Принцип действия . . . . .	169
§ 33. Ансамбль Гиббса . . . . .	177
<b>Глава VI. Элементарные приложения</b> . . . . .	183
§ 34. Гармонический осциллятор . . . . .	183
§ 35. Момент количества движения . . . . .	188
§ 36. Свойства момента количества движения . . . . .	193
§ 37. Спин электрона . . . . .	200
§ 38. Движение в центральном силовом поле . . . . .	204
§ 39. Уровни энергии атома водорода . . . . .	210
§ 40. Правила отбора . . . . .	213
§ 41. Явление Зеемана для атома водорода . . . . .	220
<b>Глава VII. Теория возмущений</b> . . . . .	223
§ 42. Общие замечания . . . . .	223
§ 43. Изменение уровней энергии, вызываемое возмущением . . . . .	224
§ 44. Возмущение как причина переходов . . . . .	229
§ 45. Приложение к излучению . . . . .	234
§ 46. Переходы, вызываемые возмущением, не зависящим от времени . . . . .	237
§ 47. Аномальный эффект Зеемана . . . . .	240
<b>Глава VIII. Задачи о столкновениях</b> . . . . .	246
§ 48. Общие замечания . . . . .	246
§ 49. Коэффициент рассеяния . . . . .	250
§ 50. Решение задачи в импульсном представлении . . . . .	256
§ 51. Дисперсионное рассеяние . . . . .	263
§ 52. Резонансное рассеяние . . . . .	266
§ 53. Испускание и поглощение . . . . .	269
<b>Глава IX. Системы, содержащие несколько одинаковых частиц</b> . . . . .	274
§ 54. Симметричные и антисимметричные состояния . . . . .	274
§ 55. Перестановки как динамические переменные . . . . .	280
§ 56. Перестановки как интегралы движения . . . . .	281
§ 57. Определение уровней энергии . . . . .	286
§ 58. Применение к электронам . . . . .	290
<b>Глава X. Теория излучения</b> . . . . .	297
§ 59. Ансамбль бозонов . . . . .	297
§ 60. Связь между бозонами и осцилляторами . . . . .	300
§ 61. Испускание и поглощение бозонов . . . . .	307
§ 62. Применение к фотонам . . . . .	310
§ 63. Энергия взаимодействия между фотоном и атомом . . . . .	315
§ 64. Испускание, поглощение и рассеяние излучения . . . . .	322
§ 65. Ансамбль фермионов . . . . .	326

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Глава XI. Релятивистская теория электрона</b>	<b>332</b>
§ 66. Релятивистское рассмотрение частицы	332
§ 67. Волновое уравнение для электрона	334
§ 68. Инвариантность относительно преобразований Лоренца	339
§ 69. Движение свободного электрона	342
§ 70. Существование спина	346
§ 71. Переход к сферическим координатам	350
§ 72. Тонкая структура уровней энергии водорода	353
§ 73. Теория позитронов	357
<b>Глава XII. Квантовая электродинамика</b>	<b>361</b>
§ 74. Электромагнитное поле в отсутствие вещества	361
§ 75. Релятивистская форма квантовых условий	366
§ 76. Шредингеровские динамические переменные	370
§ 77. Дополнительные условия	375
§ 78. Электроны и позитроны в отсутствие поля	381
§ 79. Взаимодействие	388
§ 80. Физические переменные	394
§ 81. Трудности теории	399
<b>Приложение. О каноническом преобразовании в классической и квантовой механике (В. А. Фок)</b>	<b>404</b>
<b>Лекции по квантовой механике</b>	<b>408</b>
Лекция 1. Метод Гамильтона	408
Лекция 2. Проблема квантования	427
Лекция 3. Квантование на искривленных поверхностях	442
Лекция 4. Квантование на плоских поверхностях	459
<b>Предметный указатель</b>	<b>476</b>