

Альберт Мессиа

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Том I

Перевод с французского В. Т. ХОЗЯИНОВА
под редакцией Л. Д. ФАДДЕЕВА



МОСКВА «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
ЛИТЕРАТУРЫ
1978

Квантовая механика (перевод с французского) под редакцией Л. Д. Фаддеева, Альберт Мессиа. Монография. Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1978 г.

Книга содержит изложение общего формализма квантовой механики и его приложение к простейшим системам. Изложены история возникновения квантовой теории волновые свойства материи и уравнение Шредингера, квантование системы в одном измерении и туннельный эффект. Большое внимание уделено статистической интерпретации дуализма волна — частица, соотношению неопределенности и принципу дополнительности. Разбирается классическое приближение и метод ВКБ для одномерных задач. Подробно излагается математический аппарат и его физическая интерпретация, различные представления, квантовая статистика.

Илл. 39.

Предисловие к русскому переводу	10
Предисловие	11

Ч А С Т Ь I. ФОРМАЛИЗМ И ЕГО ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

ГЛАВА I. ИСТОКИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ	15
§ 1. Введение	15
Раздел I. Конец классического периода	16
§ 2. Классическая теоретическая физика	16
§ 3. Успехи в изучении микроскопических явлений и появление квантов в физике	19
Раздел II. Световые кванты, или фотоны	22
§ 4. Фотоэлектрический эффект	23
§ 5. Эффект Комптона	24
§ 6. Световые кванты и явления интерференции	28
§ 7. Заключение	31
Раздел III. Квантование в атомных системах	32
§ 8. Атомная спектроскопия и трудности классической модели Резерфорда	32
§ 9. Квантование энергетических уровней атомов	33
§ 10. Другие примеры квантования: пространственное квантование	35
Раздел IV. Принцип соответствия и старая квантовая теория	37
§ 11. Недостаточность классической корпускулярной теории	37
§ 12. Принцип соответствия	39
§ 13. Применение принципа соответствия при вычислении постоянной Ридберга	40
§ 14. Лагранжева и гамильтонова формы уравнений классической механики	41
§ 15. Правила квантования Бора — Зоммерфельда	44
§ 16. Достижения и ограниченность старой теории квантов	49
§ 17. Заключение	50
Задачи и упражнения	52
ГЛАВА II. ВОЛНЫ ВЕЩЕСТВА И УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА	54
§ 1. Исторический обзор и общий план последующих глав	54
Раздел I. Волны вещества	58
§ 2. Введение	58
§ 3. Свободный волновой пакет. Фазовая и групповая скорости	59
§ 4. Волновой пакет в медленно меняющемся поле	62
§ 5. Квантование уровней энергии атомов	63

§ 6. Дифракция волн вещества	64
§ 7. Корпускулярная структура вещества	66
§ 8. Универсальный характер дуализма волна-частица	67
Раздел II. Уравнение Шредингера	68
§ 9. Закон сохранения числа частиц вещества	68
§ 10. Необходимость волнового уравнения и условия, которым оно должно удовлетворять	69
§ 11. Понятие оператора	70
§ 12. Волновое уравнение для свободной частицы	71
§ 13. Частица в области действия скалярного потенциала	73
§ 14. Заряженная частица в электромагнитном поле	74
§ 15. Общее правило построения уравнения Шредингера по принципу соответствия	75
Раздел III. Стационарное уравнение Шредингера	79
§ 16. Исследование стационарных состояний	79
§ 17. Общие свойства уравнения. Структура энергетического спектра. Задачи и упражнения	79
ГЛАВА III. КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ В ОДНОМ ИЗМЕРЕНИИ	84
§ 1. Введение	84
Раздел I. Прямоугольные потенциалы	85
§ 2. Общие свойства	85
§ 3. Скачок потенциала. Отражение и прохождение волн	87
§ 4. Бесконечно высокий потенциальный барьер	92
§ 5. Бесконечно глубокая потенциальная яма. Дискретный спектр	93
§ 6. Конечная потенциальная яма. Резонансы	94
§ 7. Прохождение прямоугольного потенциального барьера. Туннельный эффект	101
Раздел II. Общие свойства одномерного уравнения Шредингера	103
§ 8. Свойства вронскиана	103
§ 9. Асимптотическое поведение решений	105
§ 10. Структура спектра собственных значений	108
§ 11. Состояния непрерывного спектра: отражение и прохождение волн	109
§ 12. Число узлов связанных состояний	112
§ 13. Соотношения ортогональности	113
§ 14. Замечание по поводу четности	115
Задачи и упражнения	116
ГЛАВА IV. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОГО ДУАЛИЗМА И СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ	118
§ 1. Введение	118
Раздел I. Статистическая интерпретация волновых функций в волновой механике	119
§ 2. Вероятности результатов измерения координаты и импульса частицы	119
§ 3. Сохранение нормы во времени	122
§ 4. Понятие потока	124
§ 5. Средние значения функций от r и от p	125
§ 6. Системы многих частиц	128
Раздел II. Соотношения неопределенности Гейзенберга	132
§ 7. Соотношения неопределенности координата-импульс квантовой частицы	132
§ 8. Точное выражение соотношений неопределенности координата-импульс	135

§ 9. Обобщение: соотношения неопределенности для сопряженных переменных	137
§ 10. Соотношение неопределенности время-энергия	137
§ 11. Соотношения неопределенности для фотонов	140
Раздел III. Соотношения неопределенности и механизм измерения	141
§ 12. Неконтролируемое возмущение в процессе измерения	141
§ 13. Измерения положения в пространстве	144
§ 14. Измерения импульса	146
Раздел IV. Описание явлений в квантовой теории. Дополнительность и причинность	149
§ 15. Проблемы статистической интерпретации	149
§ 16. Описание микроскопических явлений и дополнительность	153
§ 17. Дополнительные переменные. Совместные переменные	153
§ 18. Корпускулярно-волновой дуализм и дополнительность	155
§ 19. Дополнительность и причинность	156
Задачи и упражнения	159
ГЛАВА V. ФОРМАЛИЗМ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ И ЕГО ИСТОЛКОВАНИЕ	162
§ 1. Введение	162
Раздел I. Эрмитовы операторы и физические величины	163
§ 2. Пространство волновых функций	163
§ 3. Определение средних значений	166
§ 4. Отсутствие флуктуаций и проблема собственных значений	168
Раздел II. Исследование дискретного спектра	171
§ 5. Собственные значения и собственные функции эрмитового оператора	171
§ 6. Разложение волновой функции в ряд по ортонормированным собственным функциям	173
§ 7. Статистическое распределение результатов измерений величины, оператор которой обладает полной системой собственных функций с конечной нормой	176
Раздел III. Статистика измерений в общем случае	179
§ 8. Трудности описания непрерывного спектра. Введение δ -функции Дирака	179
§ 9. Разложение по собственным функциям в общем случае. Условие замкнутости	184
§ 10. Статистическое распределение результатов измерения в общем случае	188
§ 11. Другие методы исследования непрерывного спектра	190
§ 12. Комментарии и примеры	193
Раздел IV. Определение волновой функции	195
§ 13. Операция измерения и редукция волнового пакета. Идеальные измерения	195
§ 14. Коммутирующие наблюдаемые и совместные переменные	198
§ 15. Полные наборы коммутирующих наблюдаемых	201
§ 16. Чистые и смешанные состояния	203
Раздел V. Алгебра коммутаторов и ее приложения	204
§ 17. Алгебра коммутаторов и основные свойства коммутаторов	204
§ 18. Соотношения коммутации для момента импульса	207
§ 19. Изменение статистического распределения во времени. Интегралы движения	208
§ 20. Примеры интегралов движения. Энергия. Четность	209
Задачи и упражнения	210

ГЛАВА VI. КЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ И МЕТОД ВКБ	212
Раздел I. Классический предел волновой механики	212
§ 1. Общие соображения	212
§ 2. Теорема Эренфеста	214
§ 3. Движение и распыливание волновых пакетов	216
§ 4. Классический предел уравнения Шредингера	219
§ 5. Кулоновское рассеяние. Формула Резерфорда	224
Раздел II. Метод ВКБ	226
§ 6. Основная идея метода	226
§ 7. Решения ВКБ в одном измерении	227
§ 8. Условия применимости приближения ВКБ	229
§ 9. Граничные точки и формулы согласования	230
§ 10. Прохождение потенциального барьера	233
§ 11. Уровни энергии в потенциальной яме	234
Задачи и упражнения	236
ГЛАВА VII. ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ.	
А. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ	238
§ 1. Принцип суперпозиции и представление динамических состояний векторами	238
Раздел I. Векторы и операторы	240
§ 2. Векторное пространство. Кет-векторы	240
§ 3. Дуальное пространство. Бра-векторы	241
§ 4. Скалярное произведение	243
§ 5. Линейные операторы	245
§ 6. Тензорное произведение двух векторных пространств	247
Раздел II. Эрмитовы операторы, проекторы и наблюдаемые	249
§ 7. Сопряженные операторы и правила сопряжения	249
§ 8. Эрмитовы (самосопряженные) операторы, положительно определенные операторы, унитарные операторы	251
§ 9. Проблема собственных значений и наблюдаемые	252
§ 10. Проекторы (или операторы проектирования)	255
§ 11. Алгебра проекторов	258
§ 12. Наблюдаемые, обладающие только дискретным спектром	261
§ 13. Наблюдаемые в общем случае и обобщенное соотношение замкнутости	263
§ 14. Функции наблюдаемых	265
§ 15. Операторы, коммутирующие с наблюдаемой. Коммутирующие наблюдаемые	267
Раздел III. Теория представлений	268
§ 16. Общее понятие о конечных матрицах	268
§ 17. Квадратные матрицы	270
§ 18. Бесконечные матрицы	274
§ 19. Представление векторов и операторов матрицами	275
§ 20. Преобразования матриц	278
§ 21. Смена представления	281
§ 22. Унитарные преобразования операторов и векторов	283
Задачи и упражнения	285
ГЛАВА VIII. ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ.	
Б. ОПИСАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ	287
§ 1. Введение	287
Раздел I. Динамические состояния и физические величины	289
§ 2. Определение вероятностей. Постулаты измерения	289

§ 3. Наблюдаемые квантовой системы и соотношения коммутации . . .	291
§ 4. Соотношения неопределенности Гейзенберга . . .	292
§ 5. Определение состояний и построение пространства $\mathcal{S}$. . .	294
§ 6. Квантовая одномерная система, обладающая классическим аналогом . . .	295
§ 7. Построение пространства состояний путем тензорного умножения более простых пространств . . .	299
Раздел II. Уравнения движения . . .	301
§ 8. Оператор эволюции и уравнение Шредингера . . .	301
§ 9. «Представление» Шредингера . . .	304
§ 10. «Представление» Гейзенберга . . .	306
§ 11. «Представление» Гейзенберга и принцип соответствия . . .	308
§ 12. Интегралы движения . . .	309
§ 13. Уравнение эволюции средних значений и соотношение неопределенности время-энергия . . .	310
§ 14. Промежуточные «представления» . . .	311
Раздел III. Различные представления теории . . .	313
§ 15. Определение представления . . .	313
§ 16. Волновая механика . . .	314
§ 17. Представление $\{p\}$. . .	316
§ 18. Пример: движение свободного волнового пакета . . .	318
§ 19. Другие представления. Представление, в котором диагональна энергия . . .	319
Раздел IV. Квантовая статистика . . .	320
§ 20. Системы с неполной информацией и смешанные состояния . . .	320
§ 21. Матрица плотности . . .	321
§ 22. Эволюция смешанного состояния во времени . . .	323
§ 23. Характеристические свойства матрицы плотности . . .	324
§ 24. Чистые состояния . . .	325
§ 25. Классическая статистика и квантовая статистика . . .	326
Задачи и упражнения . . .	328

Ч А С Т Ь II. ПРОСТЫЕ СИСТЕМЫ

ГЛАВА IX РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА МЕТОДОМ РАЗДЕЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ . . .	333
§ 1. Введение . . .	333
Раздел I. Частица в центрально-симметричном потенциальном поле. Общее рассмотрение проблемы . . .	334
§ 2. Гамильтониан частицы в сферических координатах . . .	334
§ 3. Отделение угловых переменных. Сферические функции . . .	337
§ 4. Радиальное уравнение . . .	339
§ 5. Собственные решения радиального уравнения. Структура спектра . . .	341
§ 6. Заключение . . .	342
Раздел II. Центральнo-симметричный прямоугольный потенциал. Свободная частица . . .	344
§ 7. Сферические функции Бесселя . . .	344
§ 8. Свободная частица. Свободные плоские и сферические волны . . .	345
§ 9. Разложение плоской волны по сферическим функциям . . .	346
§ 10. Сферическая прямоугольная яма . . .	348
Раздел III. Задача двух тел. Отделение движения центра масс . . .	349
§ 11. Отделение движения центра масс в классической механике . . .	349

§ 12. Отделение движения центра масс квантовой системы двух частиц	351
§ 13. Система многих частиц	352
Задачи и упражнения	354

ГЛАВА X. ПРОБЛЕМА РАССЕЯНИЯ. ЦЕНТРАЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ И МЕТОД ФАЗОВЫХ СДВИГОВ 356

§ 1. Введение	356

Раздел I. Эффективные сечения и амплитуды рассеяния 356

§ 2. Определение эффективных сечений	356
§ 3. Стационарная волна рассеяния	358
§ 4. Описание рассеяния при помощи пучка волновых пакетов	359
§ 5. Рассеяние волнового пакета на потенциале	362
§ 6. Вычисление эффективных сечений	364
§ 7. Столкновение двух частиц. Лабораторная система и система центра масс	365

Раздел II. Рассеяние центральным потенциалом. Фазовые сдвиги . . . 370

§ 8. Разложение по парциальным волнам. Метод фазовых сдвигов	370
§ 9. Квазиклассическое представление рассеяния. Прицельный параметр	372

Раздел III. Потенциал ограниченного радиуса действия 374

§ 10. Сдвиг фазы и логарифмическая производная	374
§ 11. Сдвиги фаз при низких энергиях ($\hbar \rightarrow \infty$)	376
§ 12. Парциальные волны более высокого порядка. Сходимость ряда ($l \rightarrow \infty$)	377
§ 13. Рассеяние на твердой сфере	377

Раздел IV. Резонансное рассеяние 380

§ 14. Рассеяние глубокой прямоугольной потенциальной ямой	380
§ 15. Общий закон резонансного рассеяния. Метастабильные состояния	382
§ 16. Наблюдение времени жизни метастабильных состояний	385

Раздел V. Различные формулы и свойства 387

§ 17. Интегральные представления фазовых сдвигов	387
§ 18. Зависимость фазовых сдвигов от формы потенциала	388
§ 19. Приближение Борна	389
§ 20. Теория эффективного радиуса действия. Формула Бете	389
Задачи и упражнения	392

ГЛАВА XI. КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 394

§ 1. Введение	394

Раздел I. Атом водорода 395

§ 2. Уравнение Шредингера для атома водорода	395
§ 3. Порядок величины энергии связи основного состояния	396
§ 4. Решение уравнения Шредингера в сферических координатах	397
§ 5. Спектр энергии. Вывод	399
§ 6. Собственные функции связанных состояний	401

Раздел II. Кулоновское рассеяние 403

§ 7. Кулоновская функция рассеяния	403
§ 8. Формула Резерфорда	405
§ 9. Разложение по парциальным волнам	407
§ 10. Разложение ψ по сферическим функциям	408
§ 11. Модификация кулоновского потенциала короткодействующим взаимодействием	410
Задачи и упражнения	412

ГЛАВА XII. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР	414
§ 1. Введение	414
Раздел I. Собственные состояния и собственные векторы гамильтониана	415
§ 2. Проблема собственных значений	415
§ 3. Введение операторов a , $a^\dagger$ и N	416
§ 4. Спектр и базисная система оператора N	417
§ 5. Представление $\{N\}$	419
§ 6. Операторы рождения и уничтожения	420
§ 7. Представление $\{Q\}$. Полиномы Эрмита	422
Раздел II. Приложения и различные свойства	423
§ 8. Производящая функция собственных функций $u_n(Q)$	423
§ 9. Интегрирование уравнений Гейзенберга	425
§ 10. Классический и квантовый осцилляторы	426
§ 11. Движение минимизирующего волнового пакета и классический предел	427
§ 12. Гармонические осцилляторы в термодинамическом равновесии	429
Раздел III. Изотропные многомерные гармонические осцилляторы	432
§ 13. Общее исследование изотропного осциллятора в p измерениях	432
§ 14. Изотропный осциллятор в двух измерениях	434
§ 15. Изотропный осциллятор в трех измерениях	437
Задачи и упражнения	440
Дополнение А. Обобщенные функции, «функция» δ и преобразование Фурье	443
Дополнение Б. Специальные функции и связанные с ними формулы	457
Предметный указатель	473

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ПЕРЕВОДУ

Настоящий двухтомный курс квантовой механики профессора А. Мессиа впервые вышел во Франции в конце пятидесятих годов. Вскоре он был переведен на английский язык, несколько раз переиздавался во Франции и приобрел широкую известность в западных странах. В настоящее время курс является основным источником ссылок на общие вопросы квантовой механики в зарубежных научных журналах. Это обусловлено большим объемом содержащегося в книге материала и подробным, тщательным его изложением. Наряду с общими положениями нерелятивистской квантовой механики в курсе дано введение в теорию Дирака и квантование электромагнитного поля, развивается необходимый для понимания основного текста математический аппарат, часть которого выделена в приложения. Большое внимание уделяется истории возникновения квантовой теории и ее философско-методологическим проблемам. Книга является хорошим учебником по квантовой механике, а объем представленного в ней материала позволяет использовать ее в справочных целях.

Курс профессора А. Мессиа несомненно будет полезен советским читателям, как тем, кто только начинает свое знакомство с квантовой теорией, так и специалистам. Он будет удачным дополнением к существующей у нас литературе по квантовой механике.

Л. Д. Фаддеев

ПРЕДИСЛОВИЕ

В наше время нет области физики, в которой можно было бы серьезно работать без хорошего знания квантовой механики. Изложение этого предмета в данной книге, как я надеюсь, достаточно просто, чтобы быть доступным для студентов, и в то же время обладает необходимой полнотой, чтобы стать справочным настольным пособием для профессионально работающих физиков.

Книга явилась результатом курса лекций, читанных в Центре ядерных исследований в Сакле, начиная с 1953 г. Многочисленные дискуссии и обсуждения как со студентами, так и с моими коллегами существенно помогли сделать изложение ряда трудных мест более ясным и доступным. Некоторые лица, которых я познакомил с отдельными частями рукописи, сделали ряд критических замечаний; я хотел бы отметить Эдмона Бауэра и Жана Ульмо, которым я обязан интересными замечаниями по поводу изложения основных принципов. Я особенно признателен Рожеру Балиану за прочтение большей части рукописи и ряд ценных замечаний, позволивших сделать некоторые улучшения текста; ему я хотел бы выразить здесь мою глубокую благодарность. Наконец, я хотел бы выразить благодарность тем моим слушателям, которые взяли на себя труд проверки текста и вычислений в различных главах, а также помогли мне при чтении корректуры.

Задачи, помещенные в конце каждой главы, выбирались не только в чисто учебных целях, но также и для того, чтобы

указать на некоторые интересные проблемы; это объясняет относительную трудность ряда задач.

Несколько книг и статей, цитированных в сносках, должны помочь читателю дополнить или углубить его знания в некоторых разделах. Не могло быть и речи о составлении полной библиографии предмета. Для этого не хватило бы и целого дополнительного тома.

Альберт Мессиа

Октябрь 1958 г.

«... он предложил ему путешествие
в Копенгаген ...»
Кандид

ЧАСТЬ I

ФОРМАЛИЗМ И ЕГО ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

§ 1. Введение

Согласно *классической доктрине*, общепринятой среди физиков до начала XX века, описание эволюции физических систем производится с помощью некоторого числа величин, так называемых *динамических переменных*; все эти переменные в каждый момент времени имеют вполне определенные значения, так что задание всей совокупности этих значений определяет динамическое состояние системы в данный момент времени; принимается, кроме того, что эволюция физической системы во времени полностью задана, если известно ее состояние в некоторый начальный момент. Математически эта основная аксиома выражается тем фактом, что динамические переменные как функции времени удовлетворяют системе дифференциальных уравнений первого порядка. Программа классической теоретической физики включает, таким образом, определение динамических переменных исследуемой системы, а затем установление тех уравнений движения, которые описывают их изменение во времени в согласии с опытными данными.

С тех времен, когда Ньютон формулировал основные законы механики, и до конца XIX века эта программа развивалась вполне успешно, причем появлению новых экспериментальных фактов в теоретическом плане соответствовало либо введение новых динамических переменных и новых уравнений, либо изменение старых уравнений, что позволяло без больших затруднений включить новое явление в общую теоретическую схему. В течение всего этого периода ни один опытный факт, ни одно физическое открытие не поставили под сомнение строгую обоснованность самой программы. Напротив, классическая физика непрерывно прогрессировала в направлении наибольшей простоты и наибольшего согласия и единства в описании всей совокупности физических явлений. Это счастливое развитие продолжалось примерно до 1900 г., но в дальнейшем, по мере накопления и углубления знаний о физических явлениях на

микроскопическом уровне¹⁾), классическая теория столкнулась с целым рядом трудностей и противоречий. Быстро стало очевидным, что физические явления на атомном и субатомном уровнях вообще не могут быть описаны на основе классической доктрины и для их объяснения нужны совершенно новые принципы. Открытие и утверждение этих новых принципов прошло несколько этапов и только к 1925 году, к моменту появления квантовой механики, была построена связная и непротиворечивая теория микроскопических явлений. В этой главе мы познакомимся с истоками и историческим развитием новой теории.

После краткого очерка основных положений и идей классической теоретической физики мы представим обзор основных физических явлений, открытие которых заставило отказаться от классических идей. Эти явления мы предполагаем известными читателю²⁾), так что ограничимся напоминанием только основных особенностей, подчеркивая те аспекты явлений, которые находятся в противоречии с классической теорией. Конец главы посвящен краткому обзору первых попыток объяснения этих явлений, которые известны под именем Старой квантовой теории.

Раздел I. КОНЕЦ КЛАССИЧЕСКОГО ПЕРИОДА

§ 2. Классическая теоретическая физика

В конце классического периода отдельные ветви физики объединились в единую и согласованную теоретическую картину мироздания, основные контуры которой таковы. В окружающей нас вселенной мы различаем две категории объектов: *вещество* и *излучение*. Вещество состоит из точно локализуемых корпускул, движение которых подчиняется законам механики Ньютона; состояние каждой корпускулы определяется в каждый момент ее положением и скоростью (или количеством движения — импульсом), т. е. всего шестью динамическими переменными. Излучение подчиняется законам электромагнитной теории Максвелла; динамические переменные излучения — число их бесконечно — суть составляющие в каждой точке пространства элек-

¹⁾ Следует уточнить понятия микроскопических и макроскопических явлений, которые будут часто использоваться в этой книге. Микроскопическая шкала соответствует атомным и субатомным явлениям, для которых характерны длины не более нескольких ангстрем ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$). Макроскопическая же шкала соответствует явлениям, которые можно наблюдать невооруженным глазом или с помощью обычного микроскопа с разрешением не более микрона (10^{-4} см).

²⁾ Детальное описание этих явлений можно найти в различных книгах, посвященных атомной физике: например, *M. Born, Atomic Physics, Blackie (Glasgow, 1957)* или *G. Bruhat, Optique, Masson (Paris, 1954)*; см. русский перевод первой книги: *М. Борн, Атомная физика, «Мир», 1965*.

трического и магнитного полей. В отличие от вещества излучение нельзя разделить на отдельные корпускулы, локализованные в пространстве и сохраняющие эту локализацию с течением времени; излучение описывается волновыми процессами, которые находят свое отражение в хорошо известных явлениях интерференции и дифракции.

Корпускулярная теория вещества развивалась в течение всего XIX века. Вначале она ограничивалась механикой небесных тел и объектов макроскопических размеров, но в дальнейшем, когда была выдвинута атомная гипотеза строения вещества, корпускулярная теория стала рассматриваться как основа объяснения всех физических явлений и на микроскопическом уровне. Ввиду невозможности прямой проверки атомной гипотезы путем изоляции отдельных молекул и изучения их взаимодействия большое внимание было уделено косвенным доказательствам того, что макроскопические свойства материальных тел следуют из законов движения отдельных молекул, их составляющих. Математически эта проблема оказалась чрезвычайно сложной. Действительно, согласно гипотезе макроскопические величины должны рассматриваться как средние значения динамических переменных системы, обладающей очень большим числом степеней свободы³⁾. Не может быть и речи о точном решении уравнений движения такой системы и приходится прибегать к статистическим методам исследования. Так родилась и стала развиваться новая дисциплина — статистическая механика. Новые результаты в исследовании газов (кинетическая теория газов) и термодинамике (статистическая термодинамика) позволили проверить качественно, а в рамках возможной точности расчетов и количественно, основные положения корпускулярной теории вещества⁴⁾.

Волновая теория излучения также покоилась на солидной основе. В области оптики старое противоречие между волновой и корпускулярной природой света было разрешено в первой половине XIX века, когда решающие успехи в решении проблемы распространения волн (Френель) позволили исследовать все следствия волновой гипотезы и объяснить на основании этой гипотезы всю совокупность известных световых явлений,

³⁾ Напомним, что число N молекул на один моль (число Авогадро) есть $N = 6,02 \cdot 10^{23}$. Первое точное определение числа N Люшмидтом (1865 г.) было основано на кинетической теории газов.

⁴⁾ Следует отметить, что во всех рассуждениях статистической механики присутствует гипотеза статистического характера, а именно — гипотеза молекулярного хаоса, от которой нельзя избавиться, оставаясь в рамках статистического метода. Хотя эта гипотеза и кажется интуитивно правильной, ее строгое доказательство (эргодическая теорема) оказалось особенно сложным и до сих пор не может считаться завершенным.

включая и геометрическую оптику. В то же время быстро развивалось изучение электрических и магнитных явлений. Решающим успехом в этой области мы обязаны Максвеллу, который в 1855 г. предложил основные уравнения электромагнитной теории; основываясь на этих уравнениях, он предсказал существование электромагнитных волн (это предсказание было наглядно подтверждено в дальнейшем открытием волн Герца) и доказал, что световая волна есть электромагнитная волна частного вида. Так произошел синтез оптики и электричества.

К концу XIX века успехи программы классической физики производили большое впечатление. Казалось, что все известные в природе физические явления находят свое объяснение в общей теории вещества и излучения; в тех же случаях, когда такое объяснение не было найдено, неудачу можно было приписать математическим трудностям, не ставя под сомнение справедливость самих основных уравнений. Особенно значительным успехом казалась достигнутая общность и универсальность теории. Стремление объединить различные области науки в единой теории всегда было наиболее плодотворным стремлением целых поколений физиков. Однако физики описываемой эпохи приписывали теории гораздо большую степень единства, чем она на самом деле обладала. Действительно, явление распространения волн отнюдь не является присущим только электромагнетизму. Исследования колебательных процессов были проведены вначале на примерах чисто материальных колебаний (колеблющиеся струны, волны на поверхности жидкости и т. д.), а волновой характер акустических явлений стал очевиден задолго до открытия световых волн. Распространение волн в веществе никак не противоречит корпускулярной теории: здесь дело идет о макроскопическом явлении, которое нетрудно объяснить с точки зрения микроскопического движения, если принять существование подходящих сил взаимодействия. По аналогии физики классической эпохи искали соответствующую среду для распространения электромагнитных волн, некоторый материальный флюид, получивший наименование эфира, структура и механические свойства которого оставались неясными. Таким образом, основной субстанцией оказывалось некоторое вещество, подчиняющееся законам механики Ньютона и наделенное такими силами взаимодействия, что в определенных условиях в этом веществе проявляются волновые процессы, частным случаем которых и являются электромагнитные волны.

Эта концепция (в дальнейшем полностью оставленная) в описываемую нами эпоху привела к постановке целой серии экспериментов, которые мало что дали для выяснения природы эфира, но один из них привел к революционному перевороту всей классической физики. Мы имеем в виду знаменитый опыт

Майкельсона — Морли (1887 г.), поставленный с целью обнаружить движение Земли относительно эфира по изменению скорости света в зависимости от направления этого движения. После ряда более или менее искусственных попыток объяснить отрицательный результат этого опыта парадокс был окончательно разрешен Эйнштейном в 1905 г. в рамках его *теории относительности*, которая явилась результатом критического анализа понятий пространства и времени и привела к отказу от понятия абсолютного времени и ряда положений механики Ньютона. Эта последняя оказалась только некоторым приближением в релятивистской механике, справедливым, когда скорости частиц малы по сравнению со скоростью света c . Мы не будем рассматривать принцип относительности, но вернемся к нему в конце этой книги, когда приступим к изучению релятивистской квантовой механики. Отметим здесь только, что принцип относительности не ставит под вопрос ни доктрину, ни программу классической физики, в том виде как они были сформулированы выше.

§ 3. Успехи в изучении микроскопических явлений и появление квантов в физике

На рубеже нового века усилия экспериментаторов были направлены на разрешение двух тесно связанных проблем: выяснения истинной микроскопической структуры вещества и законов взаимодействия материальных корпускул между собой и с электромагнитным полем.

Первые данные, касающиеся строения вещества, были получены при исследовании лучей, возникающих при электрических разрядах в разреженных газах, так называемых катодных и канальных лучей, которые в действительности оказались потоками электрически заряженных корпускул, движущихся с большей или меньшей скоростью. Так был открыт *электрон* (Дж. Дж. Томсон, 1897 г.) — частица катодного излучения; было изучено его поведение в присутствии электромагнитного поля и построена полная теория взаимодействия между электроном и электромагнитными волнами (теория электрона Лоренца)⁵⁾.

Постепенно само существование атомов и молекул, которое долгое время рассматривалось только как удобная рабочая гипотеза, было осознано как объективная реальность. Наиболее убедительным доказательством явилось изучение броуновского движения — беспорядочного движения очень малых частиц, находящихся во взвешенном состоянии в жидкости или газе; это

⁵⁾ Г. А. Лоренц, Теория электронов и ее применения к явлениям света и теплового излучения, ОНТИ, 1934; см. также L. Rosenfeld, *Théorie des électrons*, Paris, 1951.

движение возникает благодаря многочисленным беспорядочным столкновениям частиц с молекулами окружающей среды, оно как бы воспроизводит наглядно молекулярное движение и может быть количественно связано (Эйнштейн, Смолуховский, 1905 г.) со статистическими законами движения самих молекул среды.

Систематические измерения Перрена (1908 г.) подтвердили эту гипотезу и позволили произвести новые и согласующиеся между собой измерения числа Авогадро⁶⁾. После этого решающего успеха физики более не сомневались в существовании атомных и субатомных частиц. Были разработаны экспериментальные методы разной степени сложности, позволяющие наблюдать отдельные явления на микроскопическом уровне и считать отдельные микроскопические частицы (измерение элементарного заряда электрона Милликоном в 1910 г., первые наблюдения траекторий заряженных частиц в камере Вильсона в 1912 г., первый счетчик Гейгера в 1913 г.). Эти методы «прямого» наблюдения продолжали совершенствоваться в дальнейшем, они и в наше время составляют важную часть экспериментальной техники для изучения микроскопических явлений.

В то же время новая глава физики была открыта при обнаружении радиоактивности (1896 г.) — первого известного проявления свойств атомных ядер. Важное само по себе, это открытие дало в руки физиков мощное орудие исследования структуры атома, а именно — α -излучение, состоящее из ядер атомов гелия, движущихся с большой скоростью. Направляя α -излучение на различные мишени, Резерфорд (1911 г.) произвел систематическое исследование рассеяния α -частиц атомами и сумел таким путем построить первую современную модель атома.

Атом Резерфорда состоит из центрального ядра крайне малых размеров (10^{-13} — 10^{-12} см), вокруг которого движется некоторое число Z электронов. Почти вся масса атома сосредоточена в его ядре. Ядро обладает положительным электрическим зарядом Ze , который в точности компенсирует полный заряд совокупности электронов — Ze , так что в целом атом оказывается электрически нейтральным. Атом Резерфорда похож, таким образом, на солнечную систему в миниатюре, где гравитационные силы заменены на силы электромагнитные. Под действием этих сил — кулоновского притяжения со стороны ядра и кулоновского взаимного отталкивания — электроны движутся вокруг ядра по устойчивым орбитам, размеры которых порядка атомных размеров, т. е. 10^{-8} см.

⁶⁾ См. J. Perrin, Les Atomes, Paris, 1948.

Параллельно с упрочением корпускулярных представлений о строении вещества происходит углубление знаний об электромагнитном излучении. Спектр известных электромагнитных волн расширяется в направлении более коротких длин волн с открытием рентгеновских лучей (Рентген, 1895 г.), волновая природа которых устанавливается опытами по дифракции в кристаллах (фон Лауэ, 1912 г.). Для полноты упомянем еще о γ -излучении радиоактивных веществ, электромагнитная природа которого была установлена только значительно позже (на рис. 1 представлена полная шкала электромагнитного излучения различных длин волн). Совершенствуются методы спектрального анализа, позволявшие накопить большое количество информации относительно процессов испускания, рассеяния и поглощения света веществом, т. е. относительно взаимодействия между веществом и излучением на микроскопическом уровне. Уже упомянутая теория электронов Лоренца, т. е. теория заряженных частиц во взаимодействии с электромагнитным полем, позволяет в принципе объяснить все эти явления. Но именно в сравнении предсказаний этой теории с результатами эксперимента проявились первые противоречия между классической теорией и опытом.

Первые трудности возникли при изучении спектрального распределения электромагнитного излучения, находящегося в термодинамическом равновесии с веществом. Типичным примером является случай *абсолютно черного тела*; по определению — это тело, поглощающее все падающее на него излучение. Самые общие термодинамические рассуждения показывают, что излучение, испускаемое абсолютно черным телом, зависит только от температуры этого тела. Спектральное распределение интенсивности излучения абсолютно черного тела имеет, таким образом, всегда один и тот же вид и может быть выведено методами статистической термодинамики из общих законов взаимодействия между веществом и излучением. Формула, получаемая классической теорией, находится в резком противоречии с опытом. В 1900 г. Планку удалось устранить это противоречие, но ценой отказа от классического

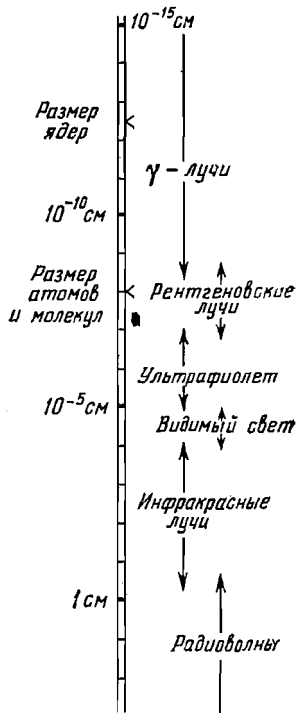


Рис. 1. Шкала длин волн электромагнитного излучения.

закона взаимодействия между веществом и излучением⁷⁾. Он выдвинул гипотезу о том, что обмен энергией между веществом и излучением происходит не непрерывным образом, а путем передачи дискретных и неделимых порций энергии, или *квантов энергии*. Планк показал, что квант энергии пропорционален частоте ν излучения

$$\epsilon_\nu = h\nu$$

и получил согласующееся с опытом выражение для спектрального распределения, выбирая соответствующим образом постоянную пропорциональности. Эта постоянная h с тех пор называется *постоянной Планка*. Она имеет размерность действия (энергия $\times$ время или импульс $\times$ длина). В дальнейшем мы будем использовать постоянную

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек.}$$

При появлении гипотезы Планка она казалась неприемлемой, подавляющее большинство физиков видело в ней только удобный математический прием, который в дальнейшем удастся объяснить на основе классической доктрины. Даже видимый успех теории Планка в объяснении результатов опыта не мог служить неопровержимым доказательством того, что обмен энергией между веществом и излучением действительно происходит квантами — закон распределения Планка есть макроскопический закон, полученный на основе гипотезы о квантах статистическими методами; он может служить лишь косвенным подтверждением гипотезы. Можно было поставить под сомнение квантовую гипотезу, подобно тому как многие годы из-за отсутствия прямых экспериментов на микроскопическом уровне вызвала сомнения гипотеза об атомном строении вещества. Однако гипотеза Планка была в дальнейшем подтверждена и дополнена целой серией опытов, позволивших анализировать элементарные процессы и доказать скачкообразность и прерывность эволюции физических систем на микроскопическом уровне, где классическая теория предсказывала непрерывную эволюцию.

Раздел II. СВЕТОВЫЕ КВАНТЫ, ИЛИ ФОТОНЫ

Первая серия экспериментальных фактов привела к радикальному пересмотру теории излучения Максвелла — Лоренца и частичному возврату к старой корпускулярной теории; имеются в виду *фотоэлектрический эффект* и *эффект Комптона*.

⁷⁾ Подробное изложение теории излучения абсолютно черного тела см. в книге М. Борна, цитированной на стр. 16.

§ 4. Фотоэлектрический эффект

Первый шаг в этом направлении был сделан Эйнштейном в его знаменитой статье 1905 г., посвященной фотоэлектрическому эффекту. Общее отношение к теории Планка в то время можно было выразить словами, что «все происходит так, как если бы обмен энергией между излучением и абсолютной черным телом происходил отдельными квантами энергии, но задача состоит в том, чтобы согласовать эту гипотезу, сделанную *ad hoc*, с волновой теорией». Приняв прямо противоположную точку зрения и пойдя далее Планка, который ограничился введением дискретности только в самый механизм поглощения и испускания излучения, Эйнштейн постулировал, что само световое излучение представляет собой поток корпускул, фотонов, обладающих энергией $h\nu$ и скоростью c (c — скорость света в пустоте $\approx 3 \cdot 10^{10}$ см/сек). Далее он показал, каким образом эта удивительная гипотеза позволяет понять целый ряд явлений, до того времени остававшихся необъяснимыми; среди них фигурирует и фотоэлектрический эффект.

Под этим названием известно явление, которое состоит в испускании электронов при облучении щелочного металла в пустоте ультрафиолетовым излучением. Интенсивность возникающего электрического тока пропорциональна интенсивности излучения, падающего на металл. Однако скорость испускаемых электронов не зависит от интенсивности излучения, она зависит только от частоты света (Ленард, 1902 г.), независимо от того, на каком расстоянии находится источник света; только число электронов, испускаемых в секунду, пропорционально интенсивности, т. е. обратно пропорционально квадрату расстояния до источника.

Объяснение этих фактов Эйнштейном очень просто. Каким бы ни было расстояние, пройденное светом после его испускания, он представляет собой поток корпускул с энергией $h\nu$. Когда один из этих фотонов встречает электрон металла, фотон полностью поглощается и электрон получает энергию $h\nu$; покидая металл, электрон должен совершить работу, равную его энергии связи в металле W , так что наблюдаемая кинетическая энергия электронов оказывается равной

$$\frac{1}{2} mv^2 = h\nu - W. \quad (1)$$

Количественные предсказания теории полностью подтверждаются экспериментом. Постоянная W , согласно предсказаниям теории, есть некоторая константа, характерная для облучаемого металла. Что касается постоянной h , то она имеет то же числен-

ное значение, что и постоянная, фигурирующая в законе спектрального распределения излучения абсолютно черного тела.

Имея в виду успех корпускулярной теории, следует выяснить, может ли классическая волновая теория также объяснить фотоэлектрический эффект. *A priori* это не кажется невозможным. Действительно, световая волна переносит некоторое количество энергии, пропорциональное ее интенсивности, и может передать всю или часть этой энергии при проникновении в металл; энергия, аккумулируемая в металле, может сконцентрироваться на некоторых электронах, которые таким образом получают возможность покинуть металл; можно представить себе, что в результате действия некоторого механизма, который следует, конечно, уточнить, электрон не может покинуть металл, пока не получит энергию, равную $h\nu$. Основное различие между таким объяснением и корпускулярной теорией заключено в непрерывном характере накопления энергии в металле; вследствие этого фотоэлектрическая эмиссия происходит не мгновенно, а спустя некоторый промежуток времени, необходимый для накопления энергии $h\nu$. Это запаздывание эмиссии может быть зарегистрировано экспериментально.

Опыты по этой схеме были поставлены Мейером и Герлахом в 1914 г. на распыленных металлах. Зная интенсивность излучения и размеры частичек «пыли», они могли вычислить минимальное время облучения, необходимое для того, чтобы пылевидные частицы металла поглотили энергию $h\nu$, которая нужна для эмиссии электрона; в условиях их эксперимента это время равнялось нескольким секундам. Однако во всех случаях они наблюдали испускание электронов одновременно с началом облучения.

Следует сделать заключение, что волновая теория света, во всяком случае в своей классической форме, неспособна дать объяснение фотоэлектрическому эффекту.

§ 5. Эффект Комптона

Эффект Комптона является другим подтверждением теории фотонов в ущерб волновой теории. Этот эффект наблюдается (Комптон, 1924 г.) при рассеянии рентгеновских лучей свободными (или слабо связанными) электронами. Длина волны рассеянного излучения превосходит длину волны падающего излучения; зависимость разности длин волн от угла θ между направлением падающей волны и направлением наблюдения рассеянного излучения выражается формулой Комптона

$$\Delta\lambda = 4\pi \frac{h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (2)$$

где m есть масса покоя электрона⁸⁾. Отметим, что $\Delta\lambda$ не зависит от длины волны падающего излучения. Комптон и Дебай показали, что явление Комптона является результатом упругого столкновения между фотоном падающего излучения и одним из электронов облучаемой мишени.

Чтобы обсудить корпускулярное объяснение эффекта, следует уточнить некоторые свойства фотонов, непосредственно вытекающие из гипотезы Эйнштейна. Поскольку фотоны движутся со скоростью света c , их масса покоя равна нулю⁹⁾. Импульс p и энергия ϵ фотона связаны поэтому соотношением

$$\epsilon = pc. \quad (3)$$

Рассмотрим плоскую монохроматическую световую волну $\exp\left[2\pi i\left(\frac{ur}{\lambda} - vt\right)\right]$, где u есть единичный вектор в направлении распространения волны, λ — длина волны, v — частота; $\lambda v = c$. В согласии с гипотезой Эйнштейна эта волна представляет собой пучок фотонов с энергией $h\nu$. Импульс этих фотонов, естественно, имеет направление u , а его абсолютное значение, согласно (3), равно

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Это соотношение есть частный случай соотношения де Бройля, с которым мы встретимся в гл. II. Часто бывает удобно ввести круговую частоту $\omega = 2\pi\nu$ и волновой вектор $k = (2\pi/\lambda)u$ плоской волны. Тогда полученные соотношения запишутся в виде:

$$\epsilon = \hbar\omega, \quad p = \hbar k. \quad (4)$$

Корпускулярная теория эффекта Комптона основана на законах сохранения энергии и импульса при упругом столкновении фотона и электрона. Пусть p и p' — начальный и конечный импульсы фотона соответственно, P' — импульс отдачи электрона после столкновения (рис. 2). Уравнения сохранения записываются в виде:

$$p = p' + P',$$

$$mc^2 + pc = \sqrt{P'^2 c^2 + m^2 c^4} + p'c. \quad (I)$$

⁸⁾ Длина $\hbar/mc$, промежуточная между средним радиусом атомов и радиусом ядер атомов ($\hbar/mc = 3,86 \cdot 10^{-10}$ см), играет определенную роль в квантовой теории электрона. Она называется *комптоновской длиной* волны электрона.

⁹⁾ Согласно принципу относительности масса покоя m , энергия ϵ и импульс p частицы связаны соотношением $\epsilon^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4$; скорость частицы есть $v = \frac{\partial \epsilon}{\partial p} = \frac{pc^2}{\epsilon}$. Если $v = c$, то $\epsilon = pc$ и $m = 0$.

Эти уравнения позволяют полностью описать столкновение, если известны начальные условия и направление излучения рассеянного фотона. Учитывая соотношения (4), нетрудно вывести формулу Комптона, которая, таким образом, оказывается теоретически обоснованной (см. задачу 1). Начиная с первых работ Комптона, все остальные предсказания теории были экспериментально подтверждены. Наблюдались и электроны отдачи, причем закон изменения их энергии в зависимости от угла Θ оказался именно таким, каким его дают уравнения (1). Эксперименты на совпадении показали, что испускание рассеянного фотона и электрона отдачи происходят одновременно, а связь между углами θ и Θ соответствует предсказаниям теории.

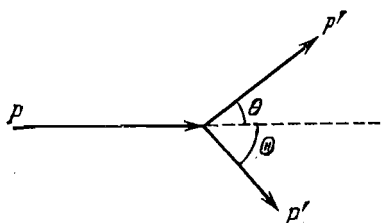


Рис. 2. Комптоновское рассеяние фотона на покоящемся электроне.

Полезно сопоставить эти результаты с предсказаниями классической теории. Теория Максвелла — Лоренца предсказывает поглощение части падающей электромагнитной энергии каждым

электроном в поле излучения и ее последующее испускание в виде излучения той же частоты. В отличие от поглощаемой радиации полный импульс испускаемого излучения равен нулю. Процесс рассеяния света сопровождается, таким образом, непрерывной передачей импульса (давление излучения) от падающей радиации к облучаемому электрону, который поэтому испытывает ускорение в направлении падающей волны. Закон поглощения и эмиссии радиации с одной частотой справедлив в системе отсчета, где электрон покоится. Как только электрон приходит в движение, частоты, наблюдаемые в лабораторной системе, изменяются вследствие эффекта Доплера. Изменение длины волны $\Delta\lambda$ зависит от угла, под которым мы наблюдаем рассеянное излучение. Простое вычисление дает

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{\text{кл}}c}{E_{\text{кл}} - P_{\text{кл}}c} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (5)$$

где λ — длина волны падающего излучения, $P_{\text{кл}}$ — импульс электрона, $E_{\text{кл}} = \sqrt{m^2c^4 + P_{\text{кл}}^2c^2}$ — его энергия. Таким образом, $\Delta\lambda$ растет с ростом $P_{\text{кл}}$ и регулярно увеличивается в процессе облучения.

Мы видим, что классические предсказания не согласуются с экспериментальными фактами. Главный недостаток классической теории эффекта Комптона состоит в предположении о *непрерывной* передаче импульса и энергии излучения *всем* электронам, подверженным радиации, в то время как наблюдаемые

факты указывают, что энергия передается *дискретным* образом только *некоторым* из них. Эта трудность той же природы, что и в случае фотоэлектрического эффекта. Оба явления, вообще говоря, довольно схожи: комптоновское рассеяние может рассматриваться как поглощение света, сопровождаемое его повторной эмиссией, в то время как фотоэлектрический эффект есть чистое поглощение.

Введение квантов света необходимо, если надлежит учесть дискретный характер процессов передачи импульса и энергии электронам. Тем не менее, сходство формул (5) и (2) для эффекта Комптона указывает, что классическая теория все же имеет некоторое отношение к реальности. Этот вопрос заслуживает более глубокого изучения.

Формула Комптона была получена выше в предположении, что электрон первоначально покоился. Но теория остается, конечно, справедливой, если первоначальная скорость электрона отлична от нуля. Нетрудно обобщить уравнения (I) и формулу Комптона на этот случай. Если электрон в начальный момент движется параллельно падающей волне с импульсом P и энергией $E = \sqrt{m^2 c^4 + P^2 c^2}$, то нетрудно получить (см. задачу 1)

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{(P+p)c}{E - Pc} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (6)$$

Легко заметить сходство этой формулы и классического выражения (5) для смещения $\Delta\lambda$. Вместо импульса $P_{\text{кл}}$ в числителе формула (6) содержит величину $P+p$ (она имеет порядок величины импульса после столкновения фотона с электроном), а в знаменателе вместо $P_{\text{кл}}$ стоит P , т. е. импульс электрона до столкновения. Однако механизм процесса, отражаемый формулой (6), существенно отличается от классического. Под действием облучения каждый электрон получает первый толчок, сопровождаемый передачей импульса и приводящий его в движение, затем второй толчок и т. д. Передаваемые импульсы изменяются от столкновения к столкновению, но величины передаваемого импульса колеблются около некоторого среднего значения, приближенно равного импульсу p падающих фотонов. Именно этот процесс скачкообразного изменения импульса на величину порядка p и результирующего изменения $\Delta\lambda$ мы можем сравнить с классическим механизмом *непрерывного* изменения величин (рис. 3).

Подобное сравнение имеет смысл, конечно, только в предельном случае, когда величина квантов энергии может считаться бесконечно малой, а число их — бесконечно большим, и мы рассматриваем результирующий средний эффект от очень большого числа последовательных столкновений. Поскольку

электрон при каждом столкновении получает импульс, по порядку величины равный p , и при большом числе столкновений флуктуационные отклонения от среднего значения компенсируются, то результирующий эффект будет таким, как если бы электрон при каждом столкновении получал в точности этот средний импульс p . Тогда импульс электрона P будет скачко-

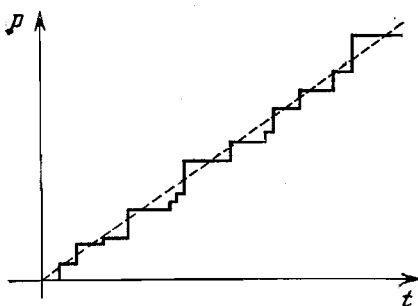


Рис. 3. Изменение во времени импульса P электрона под воздействием монохроматического излучения в результате последовательных столкновений Комптона (это крайне схематическая картина явления, границы которой будут обсуждаться в гл. IV в связи с соотношениями неопределенности). Пунктиром указана функция $P_{\text{кл}}(t)$, предсказываемая классической теорией.

образно увеличиваться в направлении падающего излучения. Скачки импульса оказываются порядка величины кванта $p = h\nu/c$, и если величина p достаточно мала, то изменение импульса будет практически непрерывным. Таким образом, в указанном приближении можно рассматривать некоторый средний импульс $\langle P \rangle$, непрерывно изменяющийся с течением времени. Экспериментальное исследование, на деталях которого мы не будем здесь останавливаться, показывает, что изменение этого среднего импульса во времени оказывается именно таким, как это предсказывает классическая теория; иными словами, векторы $\langle P \rangle$ и $P_{\text{кл}}$ оказываются равными друг другу в любой

момент времени. Кроме того, поскольку классическая величина $P_{\text{кл}}$, определяемая с точностью до p , в каждый момент времени равна среднему значению P , то смещение Комптона, предсказываемое классической теорией (уравнение (5)), в каждый момент времени равно усредненному значению действительно наблюдаемого смещения Комптона (уравнение (6)).

§ 6. Световые кванты и явления интерференции

Вся история развития оптики указывает, что классическая волновая теория правильно описывает опытные факты в макроскопических масштабах. В то же время, как мы видели, на микроскопическом уровне только корпускулярная теория может объяснить типичные явления поглощения и рассеяния света, которые соответственно являются фотоэлектрический эффект и эффект Комптона. Следует поэтому выяснить, каким образом гипотеза фотонов может быть согласована с такими явлениями

как интерференция и дифракция света, которые имеют существенно волновой характер.

Рассмотрим для примера рассеяние пучка монохроматического света на параллельной дифракционной решетке (рис. 4). Подходящим образом расположенный экран позволяет выявить интерференционную картину. Количественное исследование явления может быть проведено разными способами — например,

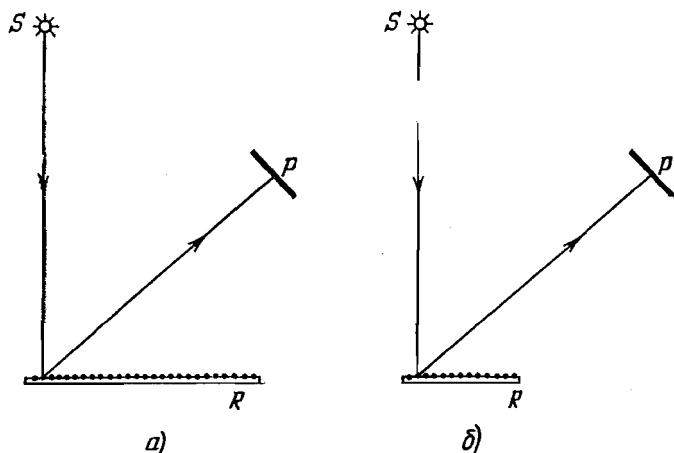


Рис. 4. Рассеяние света на решетке: S — источник света, R — дифракционная решетка, P — фотопластинка. В случае б) правая половина решетки R устранена.

можно поместить на место экрана фотографическую пластинку и проявить ее после некоторого заданного времени облучения. В этом случае интерференционная картина на негативе проявится как потемнение отдельных участков пластинки, причем это потемнение пропорционально количеству падающего на эти участки света. В действительности поглощение света пластинкой происходит отдельными квантами: каждый фотон, проникая в пластинку, возбуждает светочувствительный микрокристалл, который при проявлении дает черную точку¹⁰⁾. Невооруженным

¹⁰⁾ Описание явления здесь предельно упрощено. В действительности падение одного фотона может возбудить микрокристалл только, если энергия фотона достаточно велика (далекий ультрафиолет или рентгеновские лучи). Но даже в этом случае нужны специальные условия опыта, чтобы быть уверенным, что каждый фотон, падающий на пластинку, возбуждает один и только один микрокристалл (нужны микрокристаллы достаточной величины, достаточно толстый слой эмульсии и т. д.). Однако все эти тонкости эксперимента можно не учитывать, так как они не влияют на существо явления, которое мы рассматриваем.

глазом нельзя разрешить отдельные точки, и мы наблюдаем более или менее темные области в зависимости от числа столкновений фотонов с пластинкой на единицу площади. Однако существование отдельных столкновений может быть выявлено, если рассматривать пластинку с помощью достаточно мощного микроскопа. В обычных условиях опыта число фотонов, падающих на пластинку, очень велико, так что квазипрерывное распределение сенсibilизированных микрокристаллов дает обычную картину интерференции, предсказываемую волновой теорией.

Основываясь только на экспериментальных результатах, можно *a priori* отбросить все попытки объяснить явление интерференции в рамках чисто корпускулярной теории. Заметим прежде всего, что фотоны движутся в пространстве независимо друг от друга, их взаимодействие пренебрежимо мало. Действительно, интерференционная картина не меняется, если уменьшить интенсивность источника света и, соответственно, увеличить продолжительность облучения так, чтобы количество света, падающее на решетку, оставалось постоянным. Иными словами, если мы посылаем некоторое (очень большое) число N фотонов на решетку, то распределение сенсibilизированных точек на пластинке не зависит от группировки падающих фотонов; это справедливо и в предельном случае очень слабых интенсивностей, когда фотоны падают на решетку «по одному». То же самое распределение мы получим, если пошлем на решетку *один-единственный* фотон, а затем повторим этот опыт N раз.

Рассмотрим теперь проблему рассеяния фотона на решетке. Поскольку в условиях нашего опыта начальное состояние системы (фотон + решетка) точно не известно, не может быть и речи о том, чтобы определить траекторию фотона и, следовательно, точку удара фотона на пластинке; можно найти только статистическое распределение возможных траекторий и, соответственно, статистическое распределение точек удара. Экспериментально мы действительно наблюдаем статистическое распределение точек удара: оно соответствует закону распределения интенсивности света в интерференционной картине. Хорошо известно, что разрешающая сила решетки зависит от числа линий, ее образующих, причем чем больше линий, тем более тонкими оказываются световые полосы интерференционной картины; если убрать половину решетки, интерференционная картина существенно изменится. Именно в этом пункте корпускулярная теория оказывается в резком противоречии с экспериментом. Действительно, какими бы ни были уравнения движения каждого фотона при взаимодействии с частицами, составляющими решетку, распределение траекторий фотонов, рас-

сеянных левой половиной решетки, не может зависеть от присутствия (рис. 4, а) или отсутствия (рис. 4, б) правой половины решетки, если только не приписывать фотону размеры порядка размеров решетки. Если, кроме того, источник света и чувствительная пластинка достаточно удалены, распределения точек ударов фотонов, рассеянных обеими половинами, должны быть одинаковыми. При устранении, скажем, правой половины решетки измениться должна только интенсивность света, падающего на каждый участок пластинки, но не интерференционная картина. Опыт противоречит этим предсказаниям и заставляет нас признать, что в процессе рассеяния света принимает участие вся решетка целиком.

Гипотеза световых корпускул сталкивается с аналогичными трудностями во всех случаях интерференции или дифракции (задача 2). С помощью некоторого детектирующего прибора (экрана или фотографической пластинки) можно эффективно фиксировать прибытие фотонов одного за другим, но нельзя, не впадая в противоречие, приписать каждому фотону определенную траекторию. Таким образом, классическая доктрина, согласно которой всякая корпускула с течением времени непрерывно перемещается в пространстве, оказывается несостоятельной. На пути к детектирующему прибору свет распространяется как волна, корпускулярный аспект фотона проявляется только в момент детектирования.

§ 7. Заключение

Можно сделать ряд предварительных заключений, вытекающих из экспериментов, связанных со взаимодействием между веществом и светом на микроскопическом уровне.

Хотя наблюдаемые нарушения непрерывности могут быть объяснены только с помощью представления о световых корпускулах, не может быть и речи об отказе от понятия световой волны. Свет проявляет себя в двух аспектах: волновом и корпускулярном, в зависимости от того, какое явление мы изучаем. Соотношения (4) позволяют переходить от одного способа описания к другому. Тесная связь между двумя способами описания, как это показывает изучение опыта по рассеянию на решетке, имеет *статистическую природу*: вероятность локализации фотона в некоторой точке пропорциональна интенсивности световой волны в этой точке, вычисленной на основе методов волновой оптики. *Существование дуализма волна — корпускула несовместимо с классической доктриной*. Нельзя рассматривать свет ни как поток классических корпускул, ни как суперпозицию классических волн, не входя в противоречие с опытными данными.

Ввиду очевидной необходимости ревизии классических представлений, особенно важно подчеркнуть тот факт, что некоторые результаты классической волновой теории остаются справедливыми. В первую очередь следует отметить, что *законы сохранения энергии и импульса полностью сохраняют свою силу*. Кроме того, как мы видели на примере эффекта Комптона, *классическая теория правильно предсказывает усредненное поведение физических систем в «макроскопическом пределе»*, когда квантовые скачки можно считать пренебрежимо малыми.

Раздел III. КВАНТОВАНИЕ В АТОМНЫХ СИСТЕМАХ

§ 8. Атомная спектроскопия и трудности классической модели Резерфорда

В предшествующем разделе мы познакомились с теми глубокими потрясениями классической теории света, которые были вызваны открытием нарушений непрерывности в механизме взаимодействия между веществом и излучением. Однако дело не ограничилось теорией света, не меньшие потрясения претерпела классическая корпускулярная теория вещества. Это становится очевидным, если попытаться согласовать между собой данные атомной спектроскопии и результаты, касающиеся структуры атома, полученные Резерфордом¹¹⁾.

Одним из наиболее выдающихся фактов, обнаруженных в результате усовершенствования техники исследования спектров испускания и поглощения света веществом, явилось существование узких спектральных линий. Частоты испускаемого и поглощаемого излучения зависят от сорта изучаемых атомов; для атомов одного сорта спектры поглощения и излучения одинаковы. Каждый атом может быть идентифицирован по спектру; спектр дает важнейшую информацию относительно строения атома и механизма его взаимодействия с излучением.

Особого внимания заслуживает атом водорода, так как он является простейшим примером атомной системы (один протон + один электрон); все наблюдаемые частоты для атома водорода подчиняются эмпирической формуле Бальмера

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

¹¹⁾ Исторически первый аргумент в пользу необходимости «квантования» атомных систем был выдвинут Эйнштейном в его теории удельной теплоемкости твердых тел (1907 г.). Эта теория содержит довольно грубые приближения, неизбежные при рассмотрении столь сложных материальных систем как твердое тело. Кроме того, теория Эйнштейна использует результаты статистической термодинамики. По этим причинам мы не будем подробно рассматривать эту теорию и отсылаем читателя к другим книгам, например, книге М. Борна, цитированной на стр. 16.

причем n и m — положительные целые числа ($m > n$), а R есть некоторая характеристическая постоянная (постоянная Ридберга).

Для более сложных атомов не существует столь простых формул, однако каждый раз мы обнаруживаем некоторую корреляцию между различными наблюдаемыми частотами: если две частоты входят в состав одного спектра, то их сумма или их разность также довольно часто входят в состав того же спектра. Точнее говоря, каждому атому можно сопоставить некоторую таблицу чисел, или спектральных термов, причем все наблюдаемые частоты излучения выражаются в виде разностей между какими-либо двумя термами. Это правило, частным случаем которого и является формула Бальмера, называется *комбинационным правилом Ридберга — Ритца* (1905 г.). Отметим, что не все разности термов обязательно проявляются как частоты, наблюдаемые в спектре, однако можно формулировать достаточно простые *правила отбора*, позволяющие отличать разности термов, фигурирующие в спектре, от тех, которые не присутствуют в спектре атома.

Эти экспериментальные факты находятся в явном противоречии с классической теорией атома Резерфорда; более того, сама модель атома Резерфорда сталкивается с серьезными противоречиями, если помимо кулоновского взаимодействия учесть более строгим образом взаимодействие атомных электронов с электромагнитным полем согласно электронной теории Лоренца. Двигаясь по своим орбитам, электроны должны излучать и, следовательно, терять свою кинетическую энергию, что неизбежно должно привести к их падению на ядро атома. В каждый момент времени наблюдаемые частоты излучения должны соответствовать частотам движения по орбите или более высоким их гармоникам. Но поскольку частота движения по орбите изменяется при торможении непрерывно, должно иметь место излучение с непрерывным спектром частот. Классическая теория атома Резерфорда не объясняет, следовательно, ни устойчивости атомов, ни существования линейчатых спектров излучения. Мы имеем дело с новым проявлением дискретности или прерывности во взаимодействии между веществом и излучением, там где классическая теория предсказывает непрерывное изменение.

§ 9. Квантование энергетических уровней атомов

В 1913 г. Бор предложил общую схему объяснения атомных спектров, дополнив гипотезу существования квантов света новым постулатом, несовместимым с классическими понятиями, а именно постулатом квантования энергетических уровней атомов.

Согласно Бору атом не ведет себя как классическая система, способная непрерывно излучать энергию. Он может пребывать только в некотором числе *стационарных состояний*, или квантовых состояний, характеризуемых вполне определенной энергией. Говорят, что энергия атома квантуется. Энергия атома может изменяться только скачкообразно, причем каждый скачок соответствует переходу из одного квантового состояния в другое.

Этот постулат позволяет уточнить механизм поглощения или испускания кванта света. Атом с энергией E_i может претерпеть переход в состояние с большей энергией $E_j (> E_i)$, поглощая фотон $h\nu$, при условии сохранения полной энергии, т. е.

$$h\nu = E_j - E_i.$$

Аналогичным образом атом может совершить переход на более низкий уровень энергии $E_k (< E_i)$, испуская фотон $h\nu$, при выполнении соотношения

$$h\nu = E_i - E_k.$$

Атом, находящийся на самом низком уровне энергии (в основном состоянии), не может излучать: он устойчив.

Таким образом объясняется существование характерного для атома линейчатого спектра излучения, удовлетворяющего правилу Ридберга — Ритца: спектральные термы равны, с точностью до множителя h , энергиям квантовых состояний атома. В частном случае атома водорода формула Бальмера получается, если предположить, что уровни энергии атома даются формулой

$$E_n = -h \frac{R}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, \infty). \quad (7)$$

Другим подтверждением квантования энергетических уровней атома является опыт Франка и Герца по неупругому рассеянию электронов на атомах (1914 г.). В этом опыте атомы бомбардируются монокинетическими электронами, причем измеряется кинетическая энергия рассеянных электронов. Пусть E_0 , E_1 , E_2 , ... есть последовательность квантованных энергетических уровней атома, а T — кинетическая энергия падающих электронов. В условиях эксперимента атомы мишени практически все находятся в основных состояниях. Пока T не превосходит разность $E_1 - E_0$ между основным и первым возбужденным уровнями атома, атом не может поглотить энергию электрона, и все столкновения являются упругими. Но если $T > E_1 - E_0$, оказываются возможными и неупругие столкновения, при которых электрон теряет энергию, равную $E_1 - E_0$, а атом переходит в первое возбужденное состояние. Именно это явление и наблю-

дается в эксперименте. При $T > E_2 - E_0$ можно наблюдать столкновения, сопровождающиеся переходами во второе возбужденное состояние, и т. д.

Следовательно, квантование энергетических уровней атомов надо рассматривать как экспериментальный факт. Это свойство не является присущим только атомам. Многочисленные опыты, в частности спектроскопические, показали, что квантование энергетических уровней имеет место в молекулах и в более сложных системах частиц. Мы имеем дело с самым общим свойством вещества, которое никак не может быть объяснено классической корпускулярной теорией.

§ 10. Другие примеры квантования: пространственное квантование

Другим экспериментально наблюдаемым типом квантования является «пространственное» квантование атомных систем. Его наблюдают всякий раз, когда атом оказывается помещенным во внешнее поле, имеющее некоторое выделенное направление; в этом случае ориентация атомной системы не произвольна, а ограничивается некоторыми дискретными значениями.

Наиболее прямым доказательством существования этого типа квантования является *опыт Штерна и Герлаха* (1922 г.), в котором исследуется отклонение пучка парамагнитных атомов (или молекул) в неоднородном магнитном поле. Парамагнитные атомы по предположению обладают постоянным магнитным моментом μ и могут рассматриваться как маленькие элементарные волчки с моментом количества движения l , пропорциональным μ

$$\mu = Ml.$$

Ориентация μ и l определяет ориентацию самого атома. В магнитном поле $\mathcal{H}$ момент количества движения совершает прецессионное движение вокруг направления $\mathcal{H}$ (прецессия Лармора, см. задачу 3). Если поле $\mathcal{H}$ постоянно, то магнитная энергия $-\mu\mathcal{H}$ остается постоянной и не зависит от положения центра масс атома, так что последний совершает однородное прямолинейное движение. Если же поле $\mathcal{H}$ не постоянно в пространстве, на центр масс атома действует сила $F = \text{grad } \mu\mathcal{H}$ так что атом испытывает некоторое отклонение в своем движении. Это наблюдается в опыте Штерна и Герлаха, схема которого приведена на рис. 5. Ввиду наличия прецессионного движения вокруг направления поля $\mathcal{H}$ составляющая μ_z вдоль поля остается постоянной, а другие компоненты вектора μ колеблются около нуля. Все происходит так, как если бы атом испытывал действие усредненной силы $\mu_z \text{ grad } \mathcal{H}_z$. В обычных условиях

опыта эта средняя сила направлена вдоль оси Oz и равна $\mu_z \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z}$. Пусть $2d$ есть расстояние, проходимое атомом в магнитном поле, T — кинетическая энергия атомов в первоначальном пучке; простой расчет показывает, что скорость каждого атома отклоняется от своего первоначального направления Ox на угол $\simeq \mu_z (\partial \mathcal{H}_z / \partial z) (d/T)$. Таким образом, отклонение пропорционально составляющей вектора μ вдоль поля. Если бы атомы

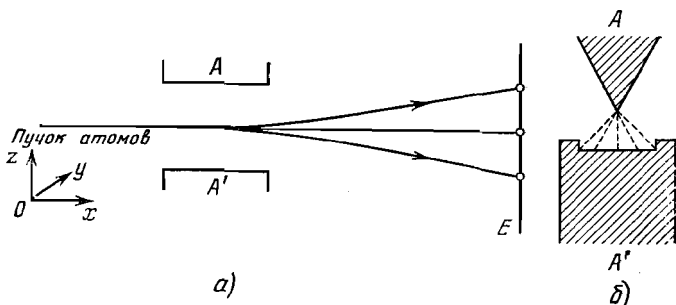


Рис. 5. Опыт Штерна и Герлаха. а) Общая схема эксперимента: атомный пучок проходит между полюсами магнита, где действует неоднородное магнитное поле AA' (направленное на рисунке вертикально); удары атомов наблюдаются на экране E . б) Поперечный разрез полюсов магнита; пунктиром указаны силовые линии магнитного поля.

были ориентированы произвольно, то μ_z принимала бы все значения от $-\mu$ до $+\mu$, а угол отклонения — все значения между крайними значениями. В этом случае на экране мы получили бы непрерывное пятно, вытянутое в направлении Oz . На самом же деле на экране наблюдается последовательность отдельных эквидистантных пятен; при изменении поля (и, следовательно $(\partial \mathcal{H}_z / \partial z)$) изменяются только расстояния между пятнами, а общая картина остается неизменной, в частности число пятен λ постоянно. Каждое пятно соответствует определенному значению μ_z . Следовательно, мы делаем вывод, что значения μ_z квантуются: всего возможно λ дискретных значений μ_z . Очевидно, что и составляющая l_z момента количества движения обладает тем же свойством.

Можно выразить сомнение в справедливости подобной интерпретации опыта Штерна и Герлаха, ибо она основана на определенной гипотезе относительно природы атомного парамагнетизма — существования постоянного магнитного момента, пропорционального моменту количества движения. Мы не будем останавливаться здесь на опытных фактах и аргументах, оправдывающих эту гипотезу (гиромангнитный эффект, теория Ланде-

вена парамагнитной восприимчивости и т. д.), отметим только, что последующее развитие квантовой механики полностью подтвердило ее. Но даже если подвергнуть сомнению объяснение опыта, данное выше, тем не менее существование λ дискретных пятен на детектирующем экране нельзя понять, если не допустить, что некоторые величины, характеризующие внутренние движения в атоме, квантуются. Действительно, если движение центра масс следует законам классической механики, то траектория атома полностью определяется его динамическим состоянием на входе в область, где действует магнитное поле. Появление ряда дискретных пятен на экране отражает тот факт, что атомы не находятся в одинаковых начальных состояниях, а статистически распределены по λ различным дискретным состояниям. Иначе говоря, некоторые динамические переменные атома квантуются. Но поскольку атомы все практически находятся в основном состоянии (в противном случае они излучали бы), дело не может идти о квантовании энергии. Далее, наблюдаемый на экране эффект связан с направлением относительно магнитного поля, поэтому динамическая переменная, подверженная квантованию, должна зависеть от ориентации атома.

Помимо опыта Штерна и Герлаха, известно много других проявлений пространственного квантования. Отметим, в частности, так называемый эффект Зеемана (1896 г.), о котором нам еще придется говорить. Все эти явления имеют одно общее происхождение — квантование момента количества движения. Это будет показано в дальнейшем при изложении результатов квантовой механики.

Раздел IV. ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ И СТАРАЯ КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

§ 11. Недостаточность классической корпускулярной теории

Квантование некоторых физических величин — и это следует особенно подчеркнуть — есть экспериментальный факт, совершенно несовместимый с классической корпускулярной теорией вещества. Так, энергия системы классических корпускул есть по самой сути своей величина, изменяющаяся непрерывно. Как бы мы ни меняли законы взаимодействия, как бы ни выбирали динамические переменные, это основное положение нельзя изменить: тот факт, что энергия системы частиц может принимать только ряд определенных дискретных значений, есть результат, выходящий за рамки классической механики. То же замечание можно сделать относительно любой квантованной величины.

В соответствии с этим и *изменение во времени квантованной величины не может быть описано в строго классических понятиях*. Рассмотрим пример атома, первоначально находящегося в первом возбужденном состоянии E_1 , а затем испускающего фотон и переходящего в основное состояние. Если, пользуясь языком классической теории, мы будем пытаться описать изменение энергии такого атома во времени, то придется сделать заключение, что в некоторый момент энергия скачкообразно изменяется от E_1 до E_0 , поскольку всякое непрерывное изменение энергии запрещено. Однако нельзя предсказать, в какой именно момент времени произойдет этот скачкообразный переход. Действительно, если *динамическое состояние атома остается строго неизменным* в течение всего времени, предшествующего скачку, то нет никаких оснований утверждать, что скачок произойдет именно в данный, а не в любой последующий момент времени. Можно говорить только о вероятности (в единицу времени) того, что скачок вообще произойдет. Классическая физика, следовательно, неспособна адекватно описать такую ситуацию; само представление о скачке, происходящем в точно определенный момент времени, оказывается некорректным. Мы не можем рассматривать энергию системы как вполне определенную функцию времени. Единственное, что можно определить — это вероятность того, что атом, первоначально находившийся в возбужденном состоянии, в некоторый заданный последующий момент времени окажется в основном состоянии. Как мы увидим далее, число атомов, остающихся в возбужденном состоянии — подобно числу нераспавшихся радиоактивных ядер — уменьшается по экспоненциальному закону, характеристическая постоянная которого равна вероятности перехода в единицу времени или, что по существу одно и то же, обратной величине среднего времени жизни возбужденного состояния.

Так возникла проблема включения вновь открытых явлений квантования физических величин (ценой отказа от некоторых классических концепций) в некую согласованную теорию строения вещества, которая позволила бы вычислять точные значения квантованных величин, а также количественно описывать различные возможные переходы, например, вычислить среднее время жизни возбужденного состояния атома, которое было упомянуто выше. Эта программа была полностью осуществлена только после создания квантовой механики в ее современной форме. Однако еще ранее Бор и его школа (Крамерс, Зоммерфельд) создали первый набросок квантовой теории, способной, в частности, правильно предсказывать спектральные термы водородоподобных атомов. Несмотря на многие принципиальные трудности и ограниченность этой старой квантовой теории, полезно знать ее основные положения, чтобы лучше понять после-

дующее развитие теории. Кроме того, в старой квантовой теории был впервые использован важный эвристический принцип, игравший большую роль в развитии квантовой механики, а именно — принцип соответствия. Ему будет уделено основное внимание в последующем изложении результатов старой квантовой теории. Она была дополнена полуклассической теорией взаимодействия между светом и веществом, также основанной на принципе соответствия, но в данной книге мы не будем касаться этого вопроса ¹²⁾).

§ 12. Принцип соответствия

Принцип соответствия был сформулирован Бором только в 1923 г. ¹³⁾, но он явился руководящей идеей во всех его предшествующих работах. Этот принцип позволяет выяснить, в какой мере понятия и результаты классической механики могут помочь в построении и интерпретации правильной теории.

Мы уже обсуждали ранее, при введении световых квантов, область применимости классической теории излучения. То, что тогда было сказано, справедливо по отношению ко всей классической теории в целом. Она корректно объясняет очень большой диапазон физических явлений как в макроскопической области, так и в некоторых случаях в области микроскопической; отметим среди последних движение электронов в постоянных электрических и магнитных полях, тепловое движение атомов и молекул в газе и т. д. Главная трудность, с которой сталкивается классическая теория на микроскопическом уровне, состоит в характерных явлениях дискретности и разрывности значений физических величин.

Можно поэтому считать установленным, что *классическая теория «макроскопически корректна»*, т. е. она правильно описывает физические явления в том предельном случае, когда квантовые скачки могут считаться пренебрежимо малыми; во всех этих случаях предсказания истинной теории должны совпадать с результатами классической теории. Это очень важное ограничивающее условие, которому должна подчиняться квантовая теория. Можно более кратко сформулировать данное требование, сказав, что *асимптотически в пределе больших квантовых чисел результаты квантовой и классической теории должны совпадать*.

¹²⁾ См. *L. de Broglie, Le principe de correspondance et les interactions entre matière et rayonnement, Actualités Scientifiques et Industrielles, Hermann (1938)*.

¹³⁾ *N. Bohr, Zeitsch. f. Phys. 13, 117 (1923)*.

Для выполнения этого условия мы исходим из *существования формальной аналогии между квантовой и классической теориями*; это «соответствие» прослеживается вплоть до самых тонких деталей и может служить руководящей идеей при истолковании результатов новой теории.

§ 13. Применение принципа соответствия при вычислении постоянной Ридберга

Проверим, что выражение (7) для уровней энергии атома водорода согласуется с принципом соответствия, и покажем, что применение этого принципа позволяет однозначно получить численное значение постоянной R , входящей в эту формулу.

Согласно классической теории Резерфорда атом водорода состоит из одного электрона и одного протона, взаимодействующих по закону Кулона (потенциал $-e^2/r$). В соответствии с законами Кеплера, которые мы предполагаем известными читателю, электрон движется по эллиптической орбите, в одном из фокусов которой находится протон (мы предполагаем его бесконечно тяжелым). Каждой орбите соответствует некоторое значение энергии E (< 0) и некоторая частота $\nu_{\text{кл}}$ движения электрона по орбите. Эти величины зависят только от размеров большой оси эллипса и связаны между собой соотношением

$$\nu_{\text{кл}}(E) = \frac{1}{\pi e^2} \left(\frac{2|E|^3}{m} \right)^{1/2}, \quad (8)$$

где m — масса электрона.

При своем движении электрон испускает электромагнитное излучение в форме суперпозиции монохроматических волн с частотами $\nu_{\text{кл}}$ и кратными гармониками, причем число высших гармоник тем больше, чем больше эксцентриситет эллиптической орбиты. Это излучение происходит непрерывно и сопровождается непрерывным уменьшением энергии E .

Эта картина должна быть сопоставлена со скачкообразным процессом потери энергии электроном, предсказываемым теорией Бора. При очень больших n расстояние между уровнями энергии пропорционально $\frac{dE}{dn} = \frac{2R\hbar}{n^3}$; для всех оптических переходов, когда относительное изменение квантового числа $\Delta n/n$ очень мало, излучаемая частота, как и в классической теории, есть гармоника (порядка $\Delta n - 1$) некоторой основной частоты

$$\nu_{\text{кв}} \approx 2 \frac{R}{n^3} = 2 \left(\frac{|E_n|^3}{R\hbar^3} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

В предельном случае больших n энергия E_n изменяется практически непрерывно путем многочисленных мелких скачков, так что спектр испускаемых частот (точнее, низкочастотная часть

этого спектра, соответствующая наиболее малым квантам энергии) должен по принципу соответствия совпадать с классическим спектром. Иначе говоря,

$$\nu_{\text{кв}} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \nu_{\text{кл}}(E). \quad (10)$$

Сравнение выражений (8) и (9) показывает, что это условие выполняется, если принять

$$R = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3}. \quad (11)$$

Экспериментальное значение R известно с большой точностью ($\approx 10^{-6}$). Теоретическое значение (11) согласуется с ним с точностью до 10^{-4} . Это один из наиболее ярких успехов теории Бора¹⁴⁾.

Эти рассуждения нетрудно распространить на случай водородоподобных атомов, состоящих из электрона и ядра заряда Ze , в частности, иона атома гелия ($Z = 2$). Достаточно во всех формулах заменить e^2 на Ze^2 . Теоретически полученные термы He^+ с той же удивительной точностью порядка 10^{-4} совпадают с наблюдаемыми экспериментально.

§ 14. Лагранжева и гамильтонова формы уравнений классической механики

Имея в виду дальнейшее обсуждение формального соответствия между квантовой и классической теориями, полезно напомнить некоторые результаты классической аналитической механики.

В самом общем случае динамическое состояние классической системы определяется переменными положения, т. е. обобщенными координатами $q_1, q_2, \dots, q_R$, и переменными скорости, т. е. производными по времени обобщенных координат $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R$; число степеней свободы системы обозначим буквой R ¹⁵⁾. Если мы имеем дело с системой из n частиц, то в качестве переменных положения можно выбрать $3n$ декартовых координат этих частиц, но все последующее справедливо и при другом вы-

¹⁴⁾ Чтобы претендовать на совпадение с экспериментальным значением столь высокой точности, необходимо учесть, что масса протона M на самом деле имеет конечное значение. Для этого следует в формуле (11) заменить массу m на приведенную массу $m' = mM/(m + M)$. Учитывая эту поправку ($\approx 5 \cdot 10^{-4}$), получаем, что теоретическое значение R несколько меньше экспериментального. Это различие имеет релятивистскую природу, что на практике выражается некоторым увеличением массы m' .

¹⁵⁾ Мы здесь рассматриваем только системы без связей, иначе говоря, переменные q могут изменяться без всяких ограничений независимо друг от друга.

боре координат. Положение системы в каждый момент времени может быть представлено в R -мерном *конфигурационном пространстве* точкой M , имеющей координаты $q_1, q_2, \dots, q_R$. Задачей классической механики является нахождение законов эволюции системы во времени или, если угодно, законов движения точки M в конфигурационном пространстве.

Для очень большого числа динамических систем — только их мы и будем здесь рассматривать — законы движения можно написать, вводя некоторую функцию, характеризующую систему, — функцию Лагранжа:

$$L \equiv L(q_1, q_2, \dots, q_R; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R; t).$$

Координаты q удовлетворяют дифференциальным уравнениям второго порядка (уравнениям Лагранжа):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

Величины

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}$$

называются *обобщенными импульсами Лагранжа*. В том случае, когда q_r есть одна из декартовых координат частицы с массой m , а силы получаются из статического потенциала, величина p_r есть соответствующая компонента количества движения этой частицы $p_r = m\dot{q}_r$.

Законы движения могут быть также выражены в форме вариационного принципа. Действительно, система уравнений Лагранжа эквивалентна *принципу наименьшего действия* (Мопертюи — Гамильтон):

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \quad \delta M(t_1) = \delta M(t_2) = 0, \quad (12)$$

смысл которого состоит в следующем: из всех законов движения $M(t)$, позволяющих системе перейти из положения M_1 в момент времени t_1 в положение M_2 в момент времени t_2 , в действительности реализуется тот, который соответствует минимуму

интеграла $\int_{t_1}^{t_2} L dt$.

Другой чрезвычайно полезной формой выражения законов классической механики является *каноническая форма Гамильтона*. Заметим, что динамическое состояние классической системы в данный момент времени полностью определяется заданием ее R обобщенных координат $q_1, q_2, \dots, q_R$ и R обобщенных импульсов $p_1, p_2, \dots, p_R$. Удобно ввести пространство $2R$ измерений, так называемое *фазовое пространство*, где дина-

мическое состояние представляется точкой P с координатами q и p . Если определить функцию Гамильтона формулой

$$H \equiv H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R; t) = \sum_{r=1}^R \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - L, \quad (13)$$

то уравнения движения записываются в канонической форме:

$$\dot{q}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r} \quad (r = 1, 2, \dots, R). \quad (14)$$

Это дифференциальные уравнения первого порядка. Задания координат и импульсов в начальный момент времени достаточно для определения их значений в любой последующий момент времени. Таким образом, если H не зависит явно от времени, то через каждую точку P фазового пространства проходит одна и только одна траектория, представляющая возможное движение системы.

В обычном случае L представляет собой разность между кинетической энергией T (являющейся квадратичной функцией $\dot{q}$) и потенциальной энергией V ; функция $H = T + V$ есть полная энергия системы, представленная как функция q и p . Однако формализм Лагранжа и Гамильтона применим при описании самого широкого класса динамических систем (см. задачу 4). Во всех случаях можно рассматривать H как полную энергию системы. Из уравнений Гамильтона следует, что $\dot{H} \equiv dH/dt = \partial H/\partial t$; это значит, что если функция Гамильтона не зависит от времени явно, то полная энергия системы есть интеграл движения. Такие системы называются консервативными.

В качестве примера рассмотрим электрон в кулоновском поле протона (предполагаемого бесконечно тяжелым). Пусть $\mathbf{r}(x, y, z)$ есть радиус-вектор электрона в системе координат с началом в точке, где находится протон, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ — скорость, $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ — импульс электрона. Функция Лагранжа есть

$$L = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{e^2}{r}.$$

Обобщенный импульс электрона имеет компоненты $p_x = \partial L/\partial v_x$, $p_y = \partial L/\partial v_y$, $p_z = \partial L/\partial v_z$, которые равны составляющим его количества движения. Из функции Гамильтона

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

получаем уравнения Гамильтона

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \text{grad} \frac{e^2}{r} = -e^2 \frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

Пользуясь этими уравнениями, легко проверить, что момент импульса (количества движения) $\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ является интегралом движения: $d\mathbf{l}/dt = 0$ (что является следствием центрально-симметричного характера потенциала $-e^2/r$) и что траектория электрона лежит в плоскости, проходящей через начало координат и перпендикулярной постоянному вектору $\mathbf{l}$.

Аналогично можно получить уравнения движения, используя всякую другую систему координат. Для траекторий, расположенных в плоскости xy ($z = \dot{z} = 0$), в полярных координатах получаем ($x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$)

$$L = \frac{m}{2} [\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2] + \frac{e^2}{r}, \quad p_r = m\dot{r}, \quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi},$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r},$$

откуда следуют уравнения Гамильтона:

$$\begin{aligned} \dot{p}_\varphi &= 0, & \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi}{mr^2}, \\ \dot{p}_r &= -\frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2}, & \dot{r} &= \frac{p_r}{m}; \end{aligned} \tag{15}$$

p_φ равно абсолютной величине момента количества движения: это действительно интеграл движения.

§ 15. Правила квантования Бора — Зоммерфельда

Старая квантовая теория по существу представляет собой общий метод вычисления квантованных величин, основанный на постулатах Бора и принципе соответствия. Процедура такова: предполагается, что системы материальных частиц подчиняются законам классической механики; постулируется, что из всех возможных решений уравнений движения должны быть отобраны только те, которые удовлетворяют некоторым правилам, вводимым *ad hoc*. Происходит отбор некоторого дискретного семейства движений, причем согласно гипотезе только эти движения и могут реализоваться на практике. Каждому из возможных движений соответствует определенное значение энергии; дискретный ряд получаемых значений энергии представляет собой спектр квантованных энергетических уровней. Аналогично получают дискретный спектр разрешенных значений для любого другого интеграла движения.

Определение «правил квантования» есть центральная проблема старой квантовой теории. Она решается по существу на основе интуиции: сначала постулируются правила, а затем спектры квантованных физических величин, следующие из этих

правил, сравниваются с экспериментальными значениями. При этом важную роль играет принцип соответствия.

Существует очень простая ситуация, когда этот принцип позволяет без труда получить искомый результат: это случай, когда классическое движение является периодическим, причем частота есть функция одной только энергии

$$\nu_{\text{кл}} = \nu_{\text{кл}}(E).$$

Именно эта ситуация реализуется в атоме водорода (см. уравнение (8)). Пусть $E_1, E_2, \dots, E_n$ есть последовательность квантованных значений энергии. Можно считать, что энергия системы есть непрерывная функция $E(n)$ квантового числа n , так что дискретности значений энергии является следствием дискретности значений аргумента n . Повторяя рассуждения § 13, касающиеся вычисления постоянной Ридберга, можно получить соотношение соответствия между классической и квантовой частотами (см. уравнение (10))

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \nu_{\text{кл}}(E),$$

откуда получается правило квантования

$$\int_{E_{\text{мин}}}^E \frac{dE}{\nu_{\text{кл}}(E)} = nh + \text{const},$$

справедливое для больших значений n . Естественно распространить это правило на все значения n и положить

$$\int_{E_{\text{мин}}}^E \frac{dE}{\nu_{\text{кл}}(E)} = nh \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (16)$$

($E_{\text{мин}}$ — есть минимальное значение энергии классической системы). В случае атома водорода это правило квантования вновь приводит к формуле Бальмера.

Это правило применяется также и к периодическим системам с одной степенью свободы. В этом случае его можно выразить в форме, более удобной для обобщений. Пусть q есть координата положения такой системы, p — ее импульс, $H(q, p)$ — полная энергия. Фазовое пространство имеет два измерения, а периодическое движение представлено замкнутыми кривыми $H(q, p) = \text{const}$ в этом пространстве¹⁶⁾. Можно показать,

¹⁶⁾ Если q есть циклическая переменная (например, угловая переменная), иначе говоря, если значения q , отличающиеся на целые значения некоторого периода Q , представляют одинаковые конфигурации системы, то периодическое движение представляется в фазовом пространстве не замкнутой кривой, а кривой с периодом Q .

используя уравнения Гамильтона, что

$$\int_{E_{\min}}^E \frac{dE}{v(E)} = \oint_{H=E} p dq,$$

где символ $\oint_{H=E}$ означает интегрирование по полному периоду

движения с энергией E (интеграл $\oint p dq$ называется интегралом действия). Так мы получим правило квантования, эквивалентное правилу (16):

$$\oint p dq = nh \quad (n = 1, 2, \dots, \infty). \quad (17)$$

Формула определяет как разрешенные траектории в фазовом пространстве, так и соответствующие квантованные значения энергии. Это правило известно как *правило квантования Бора — Зоммерфельда*.

Вильсон и Зоммерфельд обобщили это правило на случай многопериодических систем. Это системы с несколькими степенями свободы, движение которых может быть представлено при соответствующем выборе обобщенных координат $q_1, q_2, \dots, q_R$ и обобщенных импульсов $p_1, p_2, \dots, p_R$ с помощью последовательности функций $p_1(q_1), p_2(q_2), \dots, p_R(q_R)$; иначе говоря, траектории в фазовом пространстве таковы, что каждый импульс зависит только от соответствующей координаты. Каждая функция $p_r(q_r)$ представляет периодическое движение с частотой ν_r ; движение всей системы является комбинацией периодических движений с частотами $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_R$. В этом случае правилами квантования служат R соотношений

$$\oint p_r dq_r = n_r h \quad (r = 1, 2, \dots, R); \quad (18)$$

R целых квантовых чисел $n_1, n_2, \dots, n_R$ определяют квантованные траектории системы и квантованные значения различных интегралов движения, таких как энергия, момент количества движения и т. д. Энергия $E(n_1, n_2, \dots, n_R)$, рассматриваемая как функция переменных $n_1, n_2, \dots, n_R$, удовлетворяет условиям соответствия

$$\frac{\partial E}{\partial n_r} \underset{n_r \rightarrow \infty}{\sim} h\nu_r \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

В качестве приложения кратко рассмотрим квантование атома водорода. После выбора плоскости электронной орбиты мы получаем задачу, уравнения которой в полярных координатах уже были выписаны (уравнения (15)). Момент импульса

и энергия являются интегралами движения. Если фиксировать соответствующие значения L (≥ 0) и E (< 0) этих двух величин, мы получим возможную траекторию классического движения: это эллипс с эксцентриситетом $\sqrt{1 + 2L^2 E / me^4}$.

Компоненты импульса p_ϕ и p_r являются функциями соответствующих им сопряженных координат. Действительно

$$p_\phi = L, \quad \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r} = E.$$

Поэтому можно применить правила квантования Бора — Зоммерфельда:

$$\oint p_\phi d\phi = lh, \quad \oint p_r dr = kh,$$

где l — азимутальное квантовое число и k — радиальное квантовое число являются целыми положительными числами (или нулями). Первое правило дает квантованное значение момента импульса (количества движения)

$$L = l\hbar.$$

Второе же правило, после достаточно длинного, но нетрудного вычисления, приводит к соотношению

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 me^4}{(-E)}} - 2\pi L = kh,$$

откуда, вводя «главное квантовое число» $n = l + k$, получаем формулу Бальмера

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

с тем же значением постоянной Ридберга, что и полученное ранее (уравнение (11)).

Квантованная энергия зависит только от суммы двух квантовых чисел l и k . Это свойство, характерное для кулоновского потенциала, связано с тем обстоятельством, что азимутальная и радиальная частоты равны друг другу: $\nu_\phi = \nu_r$. Энергии E_n соответствуют n квантованных орбит, определяемых значениями $l = 1, 2, \dots, n$ (по причинам, которые мы не будем здесь обсуждать, значение $l = 0$ исключается); это эллипсы с эксцентриситетом $\sqrt{1 - l^2/n^2}$. Значение $l = n$ соответствует круговой орбите¹⁷⁾ (см. рис. 6).

Те же правила квантования можно применить к релятивистским уравнениям движения и получить таким образом реляти-

¹⁷⁾ Квантование круговых орбит позволило Бору уже в 1913 г. получить формулу Бальмера. Квантование эллиптических орбит было проведено Зоммерфельдом, который распространил теорию на релятивистский случай (см. ниже).

вистские поправки в теории атома водорода. Получающееся значение постоянной Ридберга находится в еще лучшем согласии с опытом (см. сноску ¹⁴). При этом происходит снятие «вырождения» уровня энергии: каждому значению n соответствуют n близких, но различных значений энергии, соответствующих различным значениям момента импульса $l\hbar$. На опыте действительно наблюдается тонкая структура спектра атома водорода, которая очень хорошо совпадает с теоретическими предсказаниями.

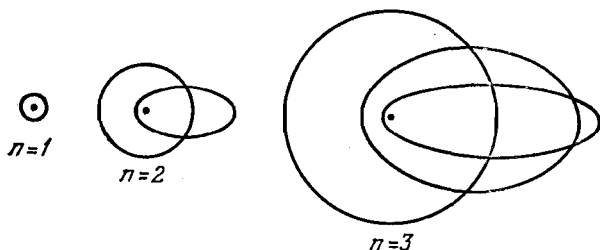


Рис. 6. Орбиты Бора основного уровня ($n=1$) и двух первых возбужденных уровней ($n=2,3$) атома водорода. Соблюдены относительные размеры орбит.

Обратимся теперь к проблеме пространственного квантования. Предшествующее рассмотрение, когда квантовались орбиты, лежащие в одной плоскости, не включало никакого выделенного направления и позволило определить только квантовые спектры скалярных величин, таких, как энергия или величина момента импульса ($L = l\hbar$). Существует общее правило пространственного квантования для систем, обладающих аксиальной симметрией (например, атом в постоянном магнитном поле). В этом случае интегралом движения является L_z — составляющая момента импульса по оси симметрии Oz . В классической механике можно показать, что эта переменная является канонически сопряженной переменной φ , фиксирующей ориентацию системы относительно оси Oz . Следовательно,

$$\int L_z d\varphi = m\hbar \quad (m — \text{целое})$$

и поскольку L_z постоянно

$$L_z = m\hbar. \quad (19)$$

Составляющая момента импульса по направлению оси аксиальной симметрии системы равна целому числу (положительному или отрицательному) постоянных Планка $\hbar$. Число m называется *магнитным квантовым числом*.

§ 16. Достижения и ограниченность старой теории квантов

На этом мы закончим изложение результатов старой теории квантов. Она позволила значительно продвинуться в исследовании атомных спектров, так как дала общий метод вычисления спектральных термов большого числа атомных и молекулярных систем. Результаты, полученные для атома водорода, без труда обобщаются на случай водородоподобных систем He^+ , Li^{++} и атомов щелочных металлов. Теория применима также к колебательным и вращательным спектрам молекул, рентгеновским спектрам атомов, нормальному эффекту Зеемана. Дополненная полуклассической теорией взаимодействия вещества и излучения, старая теория квантов дает также различные правила отбора и вероятности возможных квантовых переходов. Во всех этих случаях теория находится в прекрасном согласии с опытом, если не считать отдельных расхождений для очень малых квантовых чисел; эти расхождения могут быть устранены, если добавить к правилам квантования некоторые эмпирические поправки (примером является запрещение нулевого значения азимутального квантового числа, $l = 0$).

Тем не менее эта теория не является полной. Правила Бора — Зоммерфельда применимы только для периодических или многопериодических систем. Не существует правила квантования аperiодических движений. Так, механизм одного из основных экспериментов — опыта Франка и Герца — остается необъясненным. Теория Бора — Зоммерфельда дает квантовые уровни энергии атомной мишени, однако она не в состоянии описать траектории электронов пучка и объяснить в деталях неупругие столкновения электронов и атомов мишени. Вообще говоря, все явления столкновений остаются вне рамок этой теории. Но даже при вычислении спектральных термов успехи теории ограничиваются только простейшими системами; многочисленные трудности возникают при попытках строго поставить задачу о квантовании сложных атомов; имеются случаи резкого расхождения с опытом, например, при вычислении термов атома гелия (не ионизованного) или аномального эффекта Зеемана.

Далее, теория не лишена двусмысленностей и противоречий. Примером являются правила пространственного квантования. Правило квантования составляющей L_z момента импульса для системы, имеющей аксиальную симметрию с осью Oz , должно было бы распространяться и на случай сферической симметрии, так как это есть случай симметрии относительно любой оси, проходящей через начало координат. При этом мы пришли бы к абсурдному выводу, что составляющая момента импульса по направлению любой оси, проходящей через начало координат, должна быть целой кратной $\hbar$.

Однако принципиальные трудности старой теории квантов оказываются гораздо более серьезными. Правила квантования представляют собой чисто формальные ограничения, накладываемые на решения классических уравнений движения; они вводятся эмпирически. Полностью отсутствует более глубокое обоснование этих правил. В то же время само понятие траектории частицы трудно согласовать с требованиями правил квантования. Представление о движении по траектории подразумевает, что частица в каждый момент времени имеет вполне определенные положение и импульс, причем эти величины должны быть непрерывными функциями времени. Какой же может быть при этих условиях траектория частицы, подобной электрону в опыте Франка и Герца? Если этот электрон движется по некоторой траектории и его энергия изменяется непрерывно, то следует отказаться от возможности передачи этой энергии атому отдельными порциями — квантами, т. е. отказаться от квантования энергетических уровней атома мишени. Обратно, постулируя существование дискретных уровней энергии атома, мы должны оставить идею о движении электрона по классической траектории и, следуя логике изложения, отбросить понятие классической траектории вообще. В дальнейшем, в гл. II и IV, мы увидим, что отказ от понятия классической траектории вполне оправдан, и проанализируем его физический смысл и следствия. Как бы то ни было, мы должны отказаться от классических уравнений движения частицы, но тогда возникает вопрос, какой же физический смысл можно приписать решениям этих уравнений, которыми, по предположению, являются квантованные траектории движения электрона в атоме?

Старая теория квантов вне всякого сомнения явилась большим шагом вперед. Предсказывая на основе нескольких простых правил значительную массу экспериментальных результатов, она дала общую схему феноменологического объяснения структуры атомных спектров и в этом смысле сыграла важную роль в истории современной физики. Однако эта странная и причудливая комбинация классической механики и рецептов, вводимых *ad hoc*, никак не может рассматриваться в качестве полной и законченной теории.

§ 17. Заключение

В этой главе мы проанализировали основные трудности, с которыми столкнулась классическая теория при проникновении в область микроскопической физики. Эти трудности возникли, когда была сделана попытка понять и описать механизм взаимодействия вещества и излучения. Главная особенность явлений на микроскопическом уровне состоит в характерной прерыв-

ности, связанной с существованием неделимого кванта действия $\hbar$.

Этот *атомизм действия*, по-видимому, является одним из самых фундаментальных свойств явлений природы. В макроскопических масштабах можно рассматривать величину $\hbar$ как бесконечно малую и удовлетвориться классическим описанием физических явлений, когда эволюция физических систем представляется динамическими переменными, точно определяемыми в каждый момент и непрерывно изменяющимися во времени. Напротив, в атомной и субатомной физике мы уже не можем пренебречь величиной $\hbar$, здесь наблюдаются чисто квантовые явления. Пошатнулось все здание классической теории.

Классическое волновое описание электромагнитного излучения не может быть согласовано с тем опытным фактом, что передача энергии и импульса между веществом и излучением происходит неделимыми порциями — квантами. Фотоэлектрический эффект, эффект Комптона можно объяснить, только если представлять себе свет как поток корпускул, однако гипотеза существования фотонов не согласуется с явлениями интерференции и дифракции, в которых свет ведет себя как суперпозиция волн. Если придерживаться языка классической физики, то связанное и непротиворечивое описание всей совокупности световых явлений невозможно; в зависимости от условий эксперимента для его истолкования приходится прибегать к одному из двух несовместимых представлений: или потоку корпускул, или суперпозиции волн. Соответствие между этими представлениями дается основными соотношениями (4), которые содержат постоянную Планка $\hbar$. Возникающий дуализм волна — частица проще всего интерпретировать на статистической основе, постулируя, что интенсивность волны в некоторой точке пространства пропорциональна вероятности обнаружения в этой точке соответствующего фотона.

Что касается материальных систем, то здесь эффект квантования значений некоторых физических величин делает несостоятельной концепцию, согласно которой вещество состоит из корпускул, движение которых подчиняется законам механики Ньютона. Примерами экспериментальных фактов, противоречащих классической корпускулярной теории, являются квантование энергетических уровней атомов, квантование ориентации атомов и молекул в определенных внешних условиях.

В поисках новой согласованной теории важно учитывать те элементы классической теории, которые могут быть сохранены. В первую очередь следует упомянуть фундаментальные законы сохранения энергии и импульса; ни один из экспериментальных фактов, обсуждавшихся в этой главе, не противоречит этим законам, поэтому можно сделать обоснованный вывод, что эти

основные законы остаются справедливыми и для микроскопических явлений. Далее, единственной причиной неудач классической теории, по-видимому, является атомизм величины действия; классическая теория сохраняет свою силу в макроскопических масштабах или, в более широком смысле, в тех случаях, когда квантовые скачки могут считаться пренебрежимо малыми. Это второе утверждение лежит в основе принципа соответствия, сформулированного в конце главы. Успехи старой квантовой теории, удивительные для теории со столь противоречивыми основаниями, хорошо иллюстрируют плодотворность этого фундаментального эвристического принципа.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Рассматривается рассеяние монохроматических фотонов свободными электронами (эффект Комптона). Определить изменение длины волны, величину и направление импульса отдачи электрона в зависимости от угла рассеяния фотона, предполагая: а) что электрон первоначально покоится; б) что электрон первоначально имеет импульс P в направлении исходного пучка фотонов. Какова в обоих случаях максимальная величина импульса, передаваемого электрону?

2. Обсудить на примере эксперимента Юнга с интерференцией от двух щелей волновой и корпускулярный аспекты природы света. Показать, что представление о траектории каждого фотона, проходящей через одну из щелей, несостоятельно.

3. Гироскоп обладает магнитным моментом μ , пропорциональным моменту импульса: $\mu = Ml$. Исходя из выражения для магнитной энергии $-\mu\mathcal{H}$, вывести уравнения движения l в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$ и показать, что гироскоп совершает прецессионное движение с круговой частотой $\omega_l = M\mathcal{H}$ (частота Лармора).

4. В нерелятивистском пределе классические уравнения движения электрона в электромагнитном поле суть

$$\frac{d}{dt}(mv) = e \left(\mathcal{E} + \frac{1}{c} [v\mathcal{H}] \right). \quad (a)$$

Пусть, далее, A и Φ являются соответственно векторным и скалярным потенциалами этого поля:

$$\mathcal{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}; \quad \mathcal{H} = \text{rot } A.$$

Показать, что уравнения движения следуют из функции Лагранжа

$$L = \frac{mv^2}{2} + e \left(\frac{vA}{c} - \Phi \right).$$

Вычислить обобщенный импульс и написать функцию Гамильтона.

5. Уравнения (a) задачи 4 остаются справедливыми и в релятивистской области, если массу покоя заменить «релятивистской массой» $M = m[1 -$

$-(v^2/c^2)]^{-1/2}$. Проверить, что формализм Лагранжа и Гамильтона остается справедливым, причем уравнения получаются из функции Лагранжа

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \left(\frac{\mathbf{v} \mathbf{A}}{c} - \varphi \right).$$

Показать, что функция Гамильтона в этом случае имеет вид

$$H = \left[m^2 c^4 + \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 \right]^{1/2} + e\varphi,$$

где $\mathbf{p}$ есть обобщенный импульс, т. е. вектор с компонентами p_x, p_y, p_z .

Заметим, что $\mathbf{p} = M\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$ и $H = Mc^2 + e\varphi$; H и $\mathbf{p}c$ образуют 4-вектор в пространстве-времени, аналогично φ и $\mathbf{A}$. Имеет место соотношение $(H - e\varphi)^2 - (\mathbf{p}c - e\mathbf{A})^2 = m^2 c^4$.

6. Материальная точка с массой m вынуждена перемещаться по оси x под действием возвращающей силы $-Kx$, пропорциональной расстоянию от начала координат (*гармонический осциллятор*). Применить к этой динамической системе правило квантования Бора — Зоммерфельда: вычислить энергию, период колебаний и амплитуду квантованных траекторий.

7. Проквантовать круговые электронные орбиты водородного атома, применяя правило Бора — Зоммерфельда. Определить энергию, период и радиус основной орбиты ($mc^2 = 0,51 \text{ Мэв}$; $\hbar c/e^2 \simeq 137$) и найти в этом частном случае релятивистскую поправку. Проверить, что в пределе больших квантовых чисел частоты Бора стремятся к частотам, предсказываемым классической электродинамикой (*принцип соответствия*).

§ 1. Исторический обзор и общий план последующих глав

Основание квантовой механики приходится на период между 1923 и 1927 годами. Почти одновременно были предложены две ее эквивалентные формулировки: матричная механика и волновая механика.

Исходным пунктом *матричной механики*¹⁾ явился критический анализ положений старой квантовой теории. Точка зрения Гейзенберга может быть выражена следующим образом. Во всякой физической теории следует отличать понятия и величины, физически наблюдаемые от физически ненаблюдаемых; первые по необходимости должны фигурировать в теории, вторые же без ущерба для теории могут быть модифицированы или вовсе опущены. При построении удовлетворительной теории микроскопических явлений следует по возможности исходить только из наблюдаемых величин. В старой квантовой теории некритически использовались многие понятия, не имеющие реальной экспериментальной основы; это и явилось причиной ее неудач.

Примером экспериментально не обоснованного понятия является электронная орбита. Зададимся вопросом, можно ли на опыте проследить за движением электрона по боровской орбите атома водорода?²⁾ При наблюдении движения мы должны фиксировать последовательные положения электрона в пространстве, причем ошибка в измерении каждого положения должна, естественно, быть значительно меньше среднего радиуса a исследуемой орбиты. Подобные измерения можно было бы провести с помощью рентгеновских лучей достаточно малой длины волны $\lambda \ll a$. Однако столкновение каждого рентгеновского кванта с электроном, согласно теории эффекта Комптона, сопровождается передачей импульса порядка h/λ ($\gg h/a$), что существенно возмущает движение наблюдаемого электрона. Читатель без труда

¹⁾ W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. 33, 879 (1925); M. Born, P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. 34, 858 (1925); M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. 35, 557 (1926); P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 109, 642 (1925).

²⁾ Ограничения возможностей наблюдения, которые мы имеем в виду, не связаны с совершенством измерительной техники; эти границы ставит сама природа вещей.

проверит (см. задачу 1), что возмущение тем значительнее, чем меньше квантовое число, характеризующее орбиту; например, если электрон находится на основной орбите ($n = 1$), то средняя энергия, передаваемая при столкновении, равна по меньшей мере энергии ионизации атома. Это неконтролируемое возмущение состояния наблюдаемой системы измерительным устройством ставит предел точности, которую можно надеяться получить при измерении орбиты электрона. При малых квантовых числах любое, даже достаточно грубое измерение параметров орбиты обречено на неудачу. Но поскольку не существует эксперимента, позволяющего доказать, что электрон в атоме водорода действительно перемещается по определенной орбите, ничто не мешает нам отказаться от самого понятия орбиты электрона. Иначе говоря, из того факта, что атом находится в некотором состоянии с точно фиксированной энергией, не следует с необходимостью, что его электрон в каждый момент времени обладает строго определенными положением и импульсом³⁾.

Матричная механика Гейзенберга, Борна и Иордана не включает понятия электронной орбиты. Рассматривая только наблюдаемые на опыте величины, такие как частоты и интенсивности излучения атомов, теория каждой физической величине сопоставляет некоторую матрицу. В отличие от алгебры обычных величин матричная алгебра в общем случае некоммутативна⁴⁾, именно это существенное обстоятельство отличает новую матричную механику от механики классической. Уравнения движения динамических переменных квантовой системы являются матричными уравнениями. Следуя принципу соответствия, мы принимаем, что эти уравнения формально совпадают с уравнениями (содержащими обычные величины), которые описывают соответствующую классическую систему.

Волновая механика Шредингера⁵⁾ внешне выглядит совершенно иной теорией. Истоки ее восходят к работам Лунде Бройля⁶⁾, посвященным материальным волнам (волнам

³⁾ Этот вывод следует сравнить с результатами обсуждения опыта Франка и Герца в конце первой главы, где было показано, что существование непрерывной траектории бомбардирующего электрона несовместимо с квантованием энергетических уровней атома мишени. Признание существования дискретных квантовых уровней энергии атома ведет к отказу от понятия траектории электрона.

⁴⁾ Определение матриц и изложение их основных свойств содержится в гл. VII и VIII, где мы увидим, что существует тесная связь между матрицами и линейными операторами, о которых пойдет речь ниже (§ 11).

⁵⁾ E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 361, 489 (1925); 80, 437 (1926); 81, 109 (1926).

⁶⁾ L. de Broglie, Nature 112, 540 (1923); Диссертация (1924); Annales de Physique 2 (1925).

вещества). Пытаясь установить основные принципы единой теории вещества и излучения, де Бройль выдвинул гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм выражает фундаментальное свойство всех микроскопических объектов и, следовательно, вещество, подобно излучению, также обнаруживает и волновые, и корпускулярные свойства. Установив соответствие между динамическими переменными корпускулы и величинами, характеризующими ассоциированную с корпускулой волну, он сумел с помощью полуколичественных рассуждений получить правила квантования Бора — Зоммерфельда. Предположение де Бройля о волновой природе частиц вещества получило непосредственное подтверждение через несколько лет в результате открытия явлений дифракции частиц, аналогичных соответствующим явлениям волновой оптики. Между тем Шредингер, развивая и обобщая понятие волн вещества, открыл уравнение распространения волновой функции, представляющей данную квантовую систему. Это фундаментальное уравнение может быть выведено путем применения простого правила соответствия из функции Гамильтона соответствующей классической системы. Уравнение Шредингера лежит в основе волновой механики.

Как показал Шредингер⁷⁾, волновая механика и матричная механика эквивалентны. Они дают две частные формулировки одной единой теории, которая может быть представлена в самом общем виде. Разработка общего формализма квантовой теории была осуществлена Дираком⁸⁾. В результате возникла квантовая нерелятивистская теория материальных частиц. Она была дополнена квантовой теорией электромагнитного поля⁹⁾, что привело к построению единого согласованного теоретического метода, позволяющего исследовать все задачи, касающиеся физики систем материальных частиц в нерелятивистском приближении и их взаимодействия с электромагнитным полем. Добавим, что внутренняя непротиворечивость теории и глубокое понимание физического смысла ее формализма были достигнуты только после работ Борна, Гейзенберга и Бора¹⁰⁾. Основное

⁷⁾ E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 734 (1926).

⁸⁾ P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, Oxford Clarendon Press, 1 изд. 1930, 4 изд. 1958. Русский перевод: П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, пер. с 4-го издания, Физматгиз, 1960.

⁹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 114, 243, 710 (1927); P. Jordan, W. Pauli, Zeitsch. f. Phys. 45, 151 (1928).

¹⁰⁾ M. Born, Zeitsch. f. Phys. 38, 803 (1926); W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. 43, 172 (1927); N. Bohr, Naturwiss. 16, 245 (1928); 17, 483 (1929); 18, 73 (1930). Глубокое освещение физической интерпретации теории можно найти в книгах: W. Heisenberg, Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, Mannheim, 1958; N. Bohr, Atomic physics and human knowledge, Wiley, N. Y., 1958 — русский перевод: Н. Бор. Атомная физика и человеческое познание, ИЛ, 1961. В этих работах содержится изложение так называемой

содержание этой книги посвящено изложению аппарата и приложений нерелятивистской квантовой механики. Проблемы релятивистской квантовой механики будут рассмотрены только в последней части; мы ограничимся в основном изложением релятивистской теории электрона Дирака¹¹⁾, ее основных применений и трудностей.

Наиболее элегантным и во многих отношениях наиболее удовлетворительным способом изложения квантовой теории является тот, который основывается на общем формализме. Однако при этом сущность физических явлений может оказаться скрытой за математическим аппаратом, имеющим абстрактный характер. Волновая механика с ее более привычными представлениями о волнах и уравнениях в частных производных лучше подходит для первого ознакомления с теорией. Кроме того, именно в этой форме квантовая теория чаще всего используется в приложениях. Поэтому мы приступим к квантовой теории с общего изложения волновой механики. Эту главу мы начнем обсуждением понятия о волнах вещества, затем получим уравнение Шредингера и обсудим его основные свойства; в частности будет показано, каким образом с помощью этого уравнения определяются уровни энергии стационарных состояний.

Чтобы научиться работать с уравнением Шредингера, мы посвятим гл. III изучению простых задач, касающихся квантовых систем в одном измерении, и докажем несколько теорем об этих системах. Это даст возможность подойти к общим проблемам истолкования квантовой теории; им будет посвящена гл. IV. Глава V посвящена развитию формализма волновой механики и его статистической интерпретации, согласно принципам, сформулированным в гл. IV.

статистической интерпретации квантовой механики копенгагенской школы. Именно этой интерпретации мы будем придерживаться в данной книге. После резкой борьбы мнений и споров она была принята подавляющим большинством физиков. Тем не менее, эта интерпретация насчитывала (и насчитывает до сих пор) немало непримиримых противников, среди которых надлежит отметить Эйнштейна, Шредингера и де Бройля. Речь идет о разногласиях, которые не могут быть разрешены на основании только результатов экспериментов. Разногласия касаются общих философско-мировоззренческих вопросов истолкования науки, а не физической науки как таковой. Освещение основных этапов дискуссии можно найти в книгах: *Albert Einstein, Philosopher — Scientist*, P. A. Schilpp ed., Tudor Publ. Co., N. Y., 1949 and 1951 (см. в особенности статьи Бора и Эйнштейна) и *L. de Broglie, La Théorie de la Mesure en Mécanique Ondulatoire*, Gauthier — Villars, Paris, 1957. См. также *А. Эйнштейн*, Собрание научных трудов, том 3, «Наука», 1966. Физические и теоретико-познавательные основы квантовой механики рассмотрены в книге: *В. А. Фок*, Начала квантовой механики, «Наука», 1976 (см. в особенности гл. 1 этой книги).

¹¹⁾ *P. A. M. Dirac*, Proc. Roy. Soc. A117, 610 (1928); A118, 351 (1928).

В гл. VI рассмотрено квазиклассическое приближение в волновой механике. И только после того как будет представлена общая картина теории на языке волновой механики мы перейдем в гл. VII и VIII к изложению формального аппарата квантовой теории.

Раздел I. ВОЛНЫ ВЕЩЕСТВА

§ 2. Введение

Открытие двойственной — волновой и корпускулярной — природы света явилось одним из наиболее впечатляющих результатов введения квантов в физику. Предположим, что и вещество обладает аналогичными свойствами корпускулярно-волнового дуализма; подобно тому как электромагнитная волна ассоциируется с фотоном, допустим, что каждой материальной частице сопоставлена волна, круговая частота которой ω связана с энергией частицы E соотношением Эйнштейна $E = \hbar\omega$. Если принять эту точку зрения, то атом должен будет обладать свойствами резонирующей полости (резонатора) с дискретным рядом собственных частот; это позволит объяснить эффект квантования энергетических уровней атома.

При этом открывается возможность построить единую теорию, в которой вещество и излучение будут выступать как разновидности объектов одной природы, обладающих свойствами и волны, и корпускулы. Эти предположения, руководившие де Бройлем в его теории волн вещества, оказались, как мы увидим в дальнейшем, полностью оправданными.

Основные свойства волн вещества получаются по аналогии с оптикой. Как и в случае фотонов, мы допускаем, что значение интенсивности ассоциированной волны в каждой точке пропорционально вероятности обнаружить частицу в этой точке. Частица будет локализованной в пространстве тем лучше, чем меньшую область в пространстве занимает волна. Условия справедливости классической механики реализуются тогда, когда в течение всего времени область локализации волны можно рассматривать как точку и приписать частице определенную траекторию движения. Аналогичная ситуация встречается в оптике, если длиной волны света можно пренебречь по сравнению с другими характерными длинами: это *приближение геометрической оптики*, когда волновые свойства не проявляются. Приближение справедливо, когда оптические свойства среды, в которой распространяется свет, остаются практически постоянными на расстояниях порядка нескольких длин волн ($|\text{grad } \lambda| \ll 1$). Это приводит к заключению, что классическая теория частиц должна быть применима в случае отсутствия

внешних полей или медленно меняющихся полей, а также если мы не стремимся слишком точно локализовать частицу. Эти выводы находятся в согласии с общеизвестными результатами, касающимися движения атомных и субатомных частиц в квазистатических и квазиоднородных полях: траектории заряженных частиц в статических электрических и магнитных полях, отклонения парамагнитных атомов в опыте Штерна — Герлаха и т. д. В этих предельных случаях теория волн вещества должна быть эквивалентной классической теории частиц (принцип соответствия).

§ 3. Свободный волновой пакет. Фазовая и групповая скорости

Рассмотрим волновое движение в однородной и изотропной среде. Наиболее простым типом волны является плоская монохроматическая волна

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (1)$$

которая представляет колебание с длиной волны $\lambda = 2\pi/k$, распространяющееся в направлении волнового вектора $\mathbf{k}$ с постоянной скоростью. Скорость, о которой идет речь, есть скорость перемещения плоскости равной фазы, или *фазовая скорость*

$$v_{\phi} = \omega/k.$$

Частота ω не зависит от направления $\mathbf{k}$, но, вообще говоря, может зависеть от абсолютной величины этого вектора. Поскольку всякая волна может рассматриваться как суперпозиция плоских монохроматических волн, знания «закона дисперсии» $\omega(k)$ достаточно для исследования поведения любой волны с течением времени.

Согласно нашей гипотезе каждая частота ω соответствует вполне определенной энергии частицы

$$E = \hbar\omega. \quad (2)$$

Естественно поэтому сопоставить волну (1) прямолинейному равномерному движению с энергией E в направлении $\mathbf{k}$.

Изучение классического приближения позволит нам связать $\mathbf{k}$ с импульсом $\mathbf{p}$ частицы. Для этого следует сопоставить частице волну конечной протяженности. Волна (1), конечно, не удовлетворяет этому требованию, но ему можно удовлетворить, если воспользоваться суперпозицией волн с близкими волновыми векторами. Это значит, что следует рассмотреть *волновой пакет*

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{r} - \omega' t)} d\mathbf{k}'.$$

Обозначим буквами A и α модуль и фазу амплитуды f , соответственно. По предположению A обладает заметной величиной только в некоторой области, окружающей k . Следует выяснить в какой мере и при каких условиях «движение» волнового пакета может быть сопоставлено движению классической частицы.

Ради простоты рассмотрим вначале волновой пакет в одном измерении

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k') e^{i(k'x - \omega't)} dk'.$$

Положим

$$\varphi = k'x - \omega't + \alpha,$$

тогда $\psi(x, t)$ есть интеграл от произведения функции A , имеющей резкий максимум в области D шириной Δk , окружающей точку $k' = k$, и осциллирующей функции $e^{i\varphi}$. Если осцилляции функции $e^{i\varphi}$ в области D достаточно многочисленны, то вклады различных частей области аннулируют друг друга, так что величина ψ оказывается крайне малой. Наибольшие абсолютные значения ψ получаются в том случае, когда фаза φ остается почти постоянной в области D , т. е. $d\varphi/dk \approx 0$ (символ d/dk означает производную по k' , когда $k' = k$). Следует потребовать, чтобы $e^{i\varphi}$ имела не более одной осцилляции в области D :

$$\Delta k \left| \frac{d\varphi}{dk} \right| \leq 1.$$

Поскольку

$$\frac{d\varphi}{dk} = x - t \frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk},$$

волна $\psi(x, t)$ практически локализована в области с размерами

$$\Delta x \approx \frac{1}{\Delta k},$$

окружающей «центр волнового пакета», определенный условием $(d\varphi/dk) = 0$, т. е.

$$x = t \frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk}.$$

Эта точка равномерно движется со скоростью

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad (3)$$

которая называется *групповой скоростью* волны $e^{i(kx - \omega t)}$. Именно эта скорость v_g , а не фазовая скорость v_φ , должна быть отождествлена со скоростью частицы в классическом приближении предельной локализации пакета:

$$v = \frac{dE}{dp} \quad \left(\approx \frac{p}{m} \text{ в нерелятивистском приближении} \right).$$

Из условия $v = v_g$ и соотношения (2) находим¹²⁾ соотношение де Бройля

$$p = \hbar k = h/\lambda. \quad (4)$$

Это рассуждение без труда обобщается на волновой пакет в трех измерениях: центр пакета равномерно перемещается со скоростью

$$v_g = \text{grad}_k \omega, \quad (3')$$

причем групповая скорость должна быть отождествлена со скоростью частицы

$$v = \text{grad}_p E.$$

Последнее соотношение вместе с соотношением (2) позволяет найти связь¹³⁾ между динамическими переменными частицы и величинами, характеризующими ассоциированную ей волну:

$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k. \quad (5)$$

Эти соотношения идентичны соотношениям (1.4), полученным для случая фотона.

В заключение рассмотрим полученные результаты с точки зрения принципа относительности.

В нерелятивистском приближении энергия E определяется только с точностью до некоторой постоянной; изменить начало отсчета энергии значит добавить к частоте $\omega(k)$ некоторую постоянную частоту ω_0 (уравнение (2)), т. е. умножить функцию $\psi(r, t)$ на фазовый фактор $e^{-i\omega_0 t}$. Это не меняет предшествующих результатов, касающихся движения волнового пакета, и соотношений (5), которые из них вытекают.

Однако полученные результаты ни в коей мере не зависят от нерелятивистского приближения. Принцип относительности позволяет определить точную энергию $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ и соответствующую ей частоту ω . Энергия E и импульс p являются компонентами одного 4-вектора (принимая $c = 1$). То же самое можно сказать относительно частоты ω и волнового вектора k . Соотношения (5) удовлетворяют принципу относительности: они означают, что 4-векторы (E, p) и (ω, k) пропорциональны друг другу.

¹²⁾ Строго говоря, эти два условия позволяют определить k как функцию p только с точностью до аддитивной постоянной. Эта постоянная определяется из того условия, что соответствие между p и k не должно зависеть от направления движения по оси координат.

¹³⁾ Второе соотношение (5) получается с точностью до постоянного вектора, который мы выбираем равным нулю, чтобы соотношение не зависело от вращения системы координат (см. предшествующую сноску).

§ 4. Волновой пакет в медленно меняющемся поле

Предшествующие результаты и, в частности, соотношения (5) справедливы и в случае, когда частицы движутся в медленно меняющемся поле, причем условие классического приближения сводится к требованию, чтобы изменения поля на расстояниях порядка длины волны частицы были пренебрежимо малы.

Законы распространения соответствуют законам геометрической оптики. В частности, пакет волн ограниченных размеров, аналогичный тем, которые рассматривались в предыдущем параграфе, следует вдоль луча со скоростью, равной групповой скорости пакета. Чтобы можно было отождествить движения волнового пакета и классической частицы, необходимо:

а) чтобы лучи, соответствующие (круговой) частоте ω , были идентичны классическим траекториям частоты с энергией $E = \hbar\omega$;

б) чтобы групповая скорость вдоль каждого луча была равна скорости соответствующей классической частицы.

Траектории классической частицы определяются принципом наименьшего действия (1.12); если рассматривать траектории с заданной энергией E , то функция Лагранжа, согласно уравнению (1.13), есть $p \frac{dr}{dt} - E$, и принцип записывается в виде

$$\delta I_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} p \, dr = 0.$$

Следовательно интеграл I_{12} , вычисляемый вдоль некоторой кривой, соединяющей точки M_1 и M_2 , имеет экстремальное значение, когда эта кривая есть траектория истинного движения частицы от M_1 к M_2 . Импульс p ¹⁴⁾, вообще говоря, есть функция положения частицы r и ее скорости $v = dr/dt$, т. е. функция точки положения на кривой и направления касательной к кривой в этой точке. В случае нерелятивистской частицы в области действия скалярного потенциала $V(r)$:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad \text{и} \quad p = mv, \quad (6)$$

причем импульсы и скорости параллельны ($p \parallel dr$). Но принцип наименьшего действия имеет силу и в более общих случаях, например, для частицы, движущейся в магнитном поле.

При заданной частоте ω лучи в геометрической оптике определяются другим вариационным принципом, принципом Ферма,

¹⁴⁾ Во избежание недоразумений отметим, что под импульсом p мы всюду подразумеваем вектор, компоненты которого суть производные функции Лагранжа по компонентам скоростей (этот вектор еще называют обобщенным импульсом или канонически сопряженным импульсом); под количеством движения мы понимаем произведение скорости на массу.

который может быть выражен в следующей форме:

$$\delta J_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} \mathbf{k} \, d\mathbf{r} = 0,$$

где $\mathbf{k}$ есть волновой вектор. Интеграл J_{12} , вычисленный вдоль данной кривой, соединяющей точки M_1 и M_2 , называется оптической длиной пути вдоль этой кривой. Принцип Ферма утверждает, что луч, соединяющий M_1 и M_2 , есть кривая, вдоль которой оптическая длина пути экстремальна. В общем случае волновой вектор $\mathbf{k}$ (перпендикулярный поверхностям равной фазы) зависит от положения на кривой и от направления касательной к кривой. В изотропной среде, когда фазовая скорость не зависит от направления, вектор $\mathbf{k}$ направлен по касательной к кривой, а его абсолютная величина $k = 2\pi/\lambda$ зависит только от положения на кривой и не зависит от направления распространения. Однако принцип Ферма применяется и в случае неизотропных сред.

Нетрудно видеть, что оба вариационных принципа совершенно аналогичны по форме. Чтобы лучи, соответствующие частоте ω , можно было сопоставить классическим траекториям с энергией E (условие а)), достаточно, чтобы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$ были пропорциональны

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{k}.$$

Константа пропорциональности α может быть найдена из условия б). Групповая скорость $\mathbf{v}_g$ представляет собой градиент по $\mathbf{k}$ частоты ω ; следовательно

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \operatorname{grad}_{\mathbf{k}} E = \frac{\alpha}{\hbar} \operatorname{grad}_{\mathbf{p}} E.$$

Что касается скорости частицы, то она дается формулой $\mathbf{v} = \operatorname{grad}_{\mathbf{p}} E$. Эти две скорости равны, если $\alpha = \hbar$.

Таким образом, мы вновь получаем соотношения (5).

В случае нерелятивистской частицы в медленно меняющемся поле скалярного потенциала $V(\mathbf{r})$ волна распространяется в изотропной среде, и длина волны (см. уравнение (6)) дается выражением

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}}. \quad (7)$$

§ 5. Квантование уровней энергии атомов

Теория волн вещества позволяет просто получить условия квантования уровней энергии атомов.

Рассмотрим, для определенности, задачу об атоме водорода. Пусть мы имеем эллиптическую орбиту с энергией E . Соотноше-

ния (5) позволяют определить вектор $\mathbf{k}$ в каждой точке орбиты. При каждом обороте фаза волны увеличивается на $\oint \mathbf{k} d\mathbf{r}$. Чтобы волновая картина была стационарной, необходимо, чтобы это изменение фазы было равно целому числу 2π . Это дает условие квантования

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{r} = \hbar \oint \mathbf{k} d\mathbf{r} = nh \quad (n \text{ целое} > 0),$$

что можно переписать, используя обозначения первой главы, в следующем виде:

$$\oint p_r dr + \oint p_\varphi d\varphi = nh.$$

Аналогичные рассуждения позволяют получить правила квантования Бора—Зоммерфельда во всех случаях периодических и многопериодических движений.

Конечно все эти результаты имеют смысл только в приближении геометрической оптики, когда понятия длины волны и волнового вектора сохраняют свое значение. В частности, нельзя утверждать, что условия квантования сохраняют свою форму в случае малых квантовых чисел. Установленным является только факт квантования энергии, обязанный своим происхождением условию существования стационарной волны.

Для рассмотрения более общих случаев следует отказаться от приближенной теории, расширить область ее применения, как это делается в классической оптике при переходе от оптики геометрической к оптике волновой¹⁵⁾. Коль скоро мы постулировали существование волн вещества, следует найти уравнение, описывающее их распространение. Но прежде чем обратиться к этой проблеме, разберем вопрос об экспериментальных подтверждениях существования волн вещества.

§ 6. Дифракция волн вещества

Возможности экспериментальных наблюдений зависят, конечно, от длины волны, соответствующей изучаемому объекту. Когда мы имеем дело с макроскопическими предметами, длины волн столь малы, что всякие волновые эффекты практически ненаблюдаемы. Напротив, в случае объектов атомных размеров можно образовать пучки с длиной волны, сравнимой с длиной

¹⁵⁾ Отсюда и происходит название волновой механики.

волны рентгеновского излучения и, следовательно, осуществить опыты, аналогичные рентгеновской дифракции на кристаллах¹⁶⁾.

Первые опыты по дифракции волн вещества были сделаны с помощью электронов (*дифракция электронов*) Дэвисоном и Джермером (1927 г.), Г. П. Томсоном (1928 г.) и Руппом (1928 г.).

Дэвисон и Джермер изучали отражение на монокристалле и наблюдали пятна Лауэ, Г. П. Томсон и Рупп исследовали кольца Дебая — Шерера, получаемые при прохождении пучка через тонкую поликристаллическую мишень.

В этих экспериментах первоначальный пучок получался в результате ускорения электронов в электростатическом потенциале. Если E есть энергия электронов в электронвольтах, то длина волны де Бройля, измеряемая в ангстремах, равна

$$\lambda = \frac{12,2}{\sqrt{E(\text{эВ})}} \text{ \AA}.$$

В случае энергий от 1 до 100 кэВ мы оказываемся в области обычной спектрографии кристаллов. Зная параметры кристаллической решетки, можно из наблюдаемой интерференционной картины получить экспериментальное значение длины волны электрона; это экспериментальное значение находится в прекрасном согласии с теоретическим значением де Бройля.

Аналогичные опыты по дифракции на кристаллах производились с моноэнергетическими пучками атомов гелия и молекул водорода (Стерн, 1932 г.), что дало новое подтверждение соотношениям де Бройля.

В этих опытах длина волны соответствовала движению центров тяжести каждого атома или молекулы пучка. Те же наблюдения могут быть сделаны с использованием пучков медленных нейтронов, получаемых в ядерных реакторах. Все эти опыты показывают, что волновые свойства присущи не только электронам, а являются общим явлением, характерным для всех материальных объектов.

¹⁶⁾ Рассмотрим для определенности частицу, участвующую в броуновском движении. Наиболее мелкие частицы этого рода имеют диаметр порядка микрона и массу $M \approx 10^{-12}$ г. В термодинамически равновесном состоянии при обычных температурах их средняя кинетическая энергия $\frac{3}{2} kT$ равна примерно $0,4 \cdot 10^{-13}$ эрг, что соответствует средней длине волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3MkT}} \approx 5 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}.$$

При той же энергии атом гелия имеет длину волны $\lambda \approx 0,9 \text{ \AA}$, нейтрон — $\lambda \approx 1,8 \text{ \AA}$, а электрон — $\lambda \approx 77 \text{ \AA}$.

§ 7. Корпускулярная структура вещества

Опираясь на аналогию между волнами вещества и классической волновой оптикой, можно задаться вопросом, нельзя ли полностью отказаться от понятия частицы вещества и заменить классическую теорию чисто волновой теорией, где волна $\psi(\mathbf{r}, t)$ играла бы роль, аналогичную роли электромагнитного поля в теории излучения.

Тогда образы корпускул, порций энергии и локализованных импульсов будут заменены образом протяженной волны с непрерывным распределением энергии и импульса. Частицы классической механики будут представлены волновыми пакетами конечной протяженности, но в достаточной степени локализованными. Мы видели, что такие пакеты следуют законам движения классических частиц в некоторых предельных случаях, когда применимо классическое приближение. Однако даже в отсутствии поля волновой пакет не может бесконечно долго сохранять это сходство с частицей, так как с течением времени он расплывается и в конечном счете может занять сколь угодно большую часть пространства (см. задачу 6)¹⁷⁾. В этих условиях вызывает удивление тот факт, что вещество столь часто проявляется в форме хорошо локализованных частиц.

Но трудности чисто волновой теории такого рода становятся еще более ясно видны, если внимательно исследовать сами эксперименты по дифракции волн вещества. Рассмотрим пучок моноэнергетических электронов, проходящий через поликристаллическую мишень; на экране, расположенном за мишенью, мы наблюдаем центральное темное пятно, соответствующее проходящей волне, которое окружено концентрическими кольцами, образованными дифрагировавшей волной. Предположим, что падающая волна есть волновой пакет $\psi(\mathbf{r}, t)$, хорошо разграниченный в пространстве; этого можно добиться, поместив (рис. 7) интенсивный источник S катодных лучей за диафрагмой D , снабженной обтюратором с фиксированным временем пропускания. Эта волна проходит через пластинку C , разделяется на проходящую и дифрагировавшую волны и, наконец, образует на экране описанную выше интерференционную картину. По предположению мы имеем дело с непрерывной протяженной волной, то же самое можно сказать об интерференционной картине. Если при прочих равных условиях уменьшать интенсивность падающей волны (например, удаляя источник S от диафрагмы D), то пропорционально должна уменьшаться интенсивность интерференционных пятен, но сами они по-прежнему должны оставаться непрерывно распределенными. Опыт полностью опровергает этот

¹⁷⁾ Исключением из общего правила является гармонический осциллятор (см. гл. VI).

вывод. Оказывается, что интерференционная картина образована большим числом отдельных дискретных точек. При уменьшении интенсивности падающей волны пропорционально уменьшается число этих точек. В пределе очень слабой интенсивности можно наблюдать до одной точки, расположенной либо на месте центрального пятна, либо же на дифракционных кольцах. Естественно приписать каждую точку воздействию прошедшего через систему одного электрона, т. е. одной частицы вещества.

Заметна полная аналогия между ситуацией, описанной здесь, и опытами по рассеянию света на решетке, обсуждавшимися в

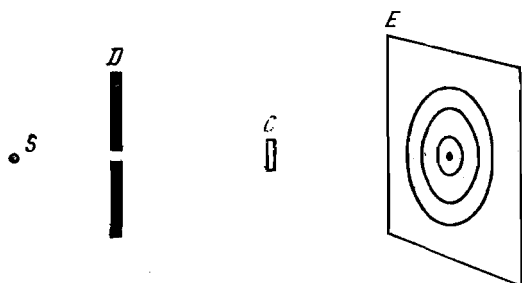


Рис. 7. Дифракция электронов на поликристаллической пластинке. Пучок электронов из источника S коллимируется диафрагмой, а затем дифрагирует на поликристаллической пластинке C . Дифракционная картина наблюдается на экране E .

первой главе. Можно продолжить эту аналогию и сделать вывод, что наиболее простое истолкование дуализма волна — частица имеет статистическую основу в том смысле, что интенсивность волны в каждой точке экрана дает вероятность попадания электрона в эту точку.

§ 8. Универсальный характер дуализма волна — частица

Из всего предшествовавшего мы делаем вывод, что микроскопические объекты обладают чрезвычайно общим свойством обнаруживать себя в двух на первый взгляд несовместимых аспектах: с одной стороны, как суперпозиция волн, с другой — как частица, т. е. локализованная порция энергии и импульса. Между этими аспектами поведения микроскопических объектов существует вполне универсальное соотношение соответствия, выражаемое формулами (5). Кроме того, связь между корпускулами и ассоциированными волнами имеет статистическую природу, которую мы уточним в дальнейшем.

Раздел II. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

§ 9. Закон сохранения числа частиц вещества

Все, что было сказано ранее, выясняет и подчеркивает замечательное подобие свойств света и вещества. Следует, однако, отметить одно очень важное различие. Даже в простейших ситуациях число присутствующих фотонов может изменяться во времени благодаря процессам испускания и поглощения. Напротив, число электронов и вообще число элементарных частиц вещества остается постоянным. На это указывают многие факты атомной физики, да и сами успехи квантовой механики систем частиц подтверждают справедливость этого важного закона сохранения. На самом деле *мы не имеем здесь абсолютного закона сохранения*, и различие между веществом и светом в этом пункте не столь очевидно, как это может показаться. С момента открытия (Андерсон, 1932 г.) позитрона — частицы той же массы, что и электрон, но противоположного заряда — стало известно, что в некоторых обстоятельствах возможно образование электрон-позитронных пар (испускание вещества), с другой стороны электрон и позитрон при столкновении могут аннигилировать (поглощение вещества), освобождая энергию в виде излучения. Согласно закону эквивалентности массы и энергии, энергия, необходимая для порождения пары электрон — позитрон, по меньшей мере равна $2mc^2$ ($\approx 1 \text{ Мэв}$). Другой пример испускания электронов (или позитронов) дает β -распад атомных ядер. Но если ограничиться явлениями атомной физики, то позитроны отсутствуют, ядра устойчивы, а все передачи энергии по величине ниже порога образования электрон-позитронных пар; в этой ситуации закон сохранения числа частиц строго соблюдается. В дальнейшем мы будем рассматривать только этот случай.

Закон сохранения числа частиц существенно упрощает построение и истолкование квантовой теории вещества. Различные квантовые системы, изучаемые нами, обычно состоят из данного числа частиц вещества. Простейшая система включает только одну частицу (например, электрон во внешнем поле); ассоциированная волна $\Psi(\mathbf{r}; t)$ в каждый момент времени есть функция координат, характеризующих положение этой частицы в пространстве. Атом водорода есть система из двух частиц (электрона и протона), находящихся во взаимодействии; соответствующая волна $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p; t)$ зависит от положений $\mathbf{r}_e$ и $\mathbf{r}_p$ этих двух частиц. Сложный атом состоит из ядра с зарядом Ze в точке $\mathbf{R}$ и Z электронов в точках $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z$; ассоциированная волна выражается некоторой функцией $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z; t)$. Сходным образом определяются волновые функции более сложных систем.

§ 10. Необходимость волнового уравнения и условия, которым оно должно удовлетворять

Мы видели, что интенсивность ассоциированной волны в данной точке в данный момент времени дает вероятность найти частицу в этой точке в этот момент времени. В квантовой механике мы постулируем, что волновая функция Ψ квантовой системы полностью определяет динамическое состояние системы, т. е. что все предсказания, которые могут быть сделаны относительно различных динамических свойств системы в данный момент времени t , следуют из значения функции Ψ в этот момент времени t . Основная задача теории может быть сформулирована так: зная волновую функцию в начальный момент времени t_0 определить ее значения в последующие моменты времени. Для этого необходимо знать уравнение распространения волны Ψ .

Вполне очевидно, что искомое уравнение не может быть получено путем какого-либо дедуктивного рассуждения. Как всякое уравнение математической физики оно должно быть постулировано; единственным оправданием того или иного выбора служит сравнение теоретических предсказаний, получаемых с помощью уравнения, с результатами эксперимента. Тем не менее выбор уравнения лимитируется *a priori* некоторыми условиями, вытекающими из требований, налагаемых на функцию Ψ :

А) Уравнение должно быть *линейным* и *однородным*; тогда волна удовлетворяет принципу суперпозиции, характерному для волновых процессов в общем случае. Именно, если Ψ_1 и Ψ_2 являются решениями уравнения, то и всякая линейная комбинация $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ этих функций есть решение того же уравнения.

Б) Уравнение должно быть дифференциальным уравнением *первого порядка относительно времени*; именно в этом случае знание Ψ в данный начальный момент времени оказывается достаточным для определения последующей эволюции Ψ , согласно гипотезе о том, что динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием Ψ .

С другой стороны, предсказания теории должны совпадать с предсказаниями классической механики в области справедливости последней. Другими словами, уравнение должно приводить к тем же законам движения волновых пакетов, что и теория де Бройля в приближении геометрической оптики. Это значит, что искомое уравнение должно обладать формальным сходством с некоторыми уравнениями классической механики (*принцип соответствия*).

Следуя этим указаниям, мы довольно просто придем к уравнению Шредингера. Но прежде нам следует ввести одно математическое понятие, которое окажется чрезвычайно полезным в дальнейшем: понятие оператора.

§ 11. Понятие оператора

Рассмотрим функцию $\partial\Psi/\partial t$, т. е. производную по времени от Ψ ; можно сказать, что оператор $\partial/\partial t$, действуя на функцию Ψ , дает функцию $\partial\Psi/\partial t$. В общем случае, если некоторая операция позволяет сопоставить каждой функции Ψ в некотором функциональном пространстве одну и только одну вполне определенную функцию Ψ' в том же пространстве, то говорят, что Ψ' есть функция, получаемая в результате действия некоторого оператора A из этого пространства на функцию Ψ , и записывают это так:

$$\Psi' = A\Psi.$$

Оператор A является *линейным*, если его действие на функцию $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$, т. е. на линейную комбинацию Ψ_1 и Ψ_2 с постоянными (комплексными) коэффициентами (Ψ_1 и Ψ_2 принадлежат одному пространству), выражается формулой

$$A(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(A\Psi_1) + \lambda_2(A\Psi_2).$$

Среди операторов, способных действовать на волновые функции $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}; t) \equiv \Psi(x, y, z; t)$, ассоциированные с частицей, можно выделить два особенно важных типа линейных операторов:

1° дифференциальные операторы $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial z$, $\partial/\partial t$ и

2° операторы вида $f(\mathbf{r}, t)$, действие которых состоит в умножении функции Ψ на функцию $f(\mathbf{r}, t)$.

Исходя из некоторых линейных операторов, можно получать другие линейные операторы с помощью следующих алгебраических операций:

а) умножения оператора A на постоянную c

$$(cA)\Psi \equiv c(A\Psi);$$

б) составления суммы $S = A + B$ двух операторов

$$S\Psi \equiv A\Psi + B\Psi;$$

в) получения произведения $P = AB$, где оператор B умножается на оператор A

$$P\Psi \equiv AB\Psi \equiv A(B\Psi).$$

Отметим, что, в отличие от суммы, *произведение двух операторов не коммутативно*. В этом состоит очень важное различие

между алгеброй линейных операторов и алгеброй чисел. Произведение AB не обязательно тождественно произведению BA ; в первом случае оператор B первым действует на функцию Ψ , затем оператор A действует на функцию $(B\Psi)$ и дает окончательный результат; во втором случае операторы A и B переставлены между собой. Разность $AB - BA$ двух произведений называется *коммутатором* операторов A и B ; коммутатор обозначается символом

$$[A, B] \equiv AB - BA. \quad (8)$$

Если указанная разность равна нулю, говорят, что операторы коммутируют

$$AB = BA.$$

В качестве примера некоммутирующих операторов укажем оператор $f(x)$, т. е. оператор умножения на заданную функцию $f(x)$, и оператор дифференцирования $\partial/\partial x$. Действительно, какой бы ни была функция Ψ :

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \Psi = \frac{\partial}{\partial x} (f\Psi) = \frac{\partial f}{\partial x} \Psi + f \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi.$$

Иначе говоря,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, f(x) \right] = \frac{\partial f}{\partial x} \quad (9)$$

и, в частности,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right] = 1. \quad (10)$$

Напротив, все операторы дифференцирования $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial z$, $\partial/\partial t$ коммутируют между собой.

Типичным примером линейного оператора, полученного путем умножения и суммирования линейных операторов, является оператор Лапласа

$$\Delta \equiv \text{div grad} \equiv \nabla \nabla \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

который можно рассматривать как скалярное произведение самого на себя векторного оператора градиента $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$.

§ 12. Волновое уравнение для свободной частицы

Теория волн вещества позволяет без затруднений написать волновое уравнение для свободной частицы в нерелятивистском приближении. Действительно, волна $\Psi(\mathbf{r}; t)$ может быть представлена как суперпозиция

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar} d\mathbf{p} \quad (11)$$

плоских монохроматических волн $\exp[i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar]$, причем частота $E/\hbar$ связана с волновым вектором $\mathbf{p}/\hbar$ соотношением, связывающим энергию и импульс частицы

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (12)$$

Образуя частные производные от обеих частей равенства (11) (здесь мы не обсуждаем математических вопросов сходимости соответствующих интегралов), получим последовательно:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \int E F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar} d\mathbf{p}, \quad (13)$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{p} F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar} d\mathbf{p}, \quad (14)$$

$$-\hbar^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) = \int p^2 F(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar} d\mathbf{p}. \quad (15)$$

Согласно соотношению (12) подынтегральные выражения в уравнениях (13) и (15) пропорциональны друг другу, то же можно сказать и о самих интегралах. Поэтому

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (16)$$

Это и есть уравнение Шредингера для свободной частицы; оно удовлетворяет условиям А) и Б), см. § 10; из самого вывода следует, что уравнение удовлетворяет требованиям принципа соответствия. Имеет место формальная аналогия с классической механикой: уравнение (16) представляет собой как бы квантовый аналог классического уравнения (12). При этом энергия и импульс на квантовом языке представляются дифференциальными операторами, действующими на волновую функцию согласно правилам соответствия

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (17)$$

Таким образом, величина $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ представляется оператором

$$-\hbar^2 \Delta \equiv \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$

Подобно соотношению (12) уравнение (16) не удовлетворяет, естественно, принципу относительности. В то же время теория де Бройля сама по себе не имеет подобного ограничения. Чтобы получить релятивистское уравнение для свободной частицы, разумно следовать той же схеме рассуждений, что и выше, но заменить уравнение (12) его релятивистским аналогом. Правильное соотношение $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ не подходит по причине

наличия квадратного корня. Чтобы обойти эту трудность, можно использовать соотношение

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4, \quad (18)$$

откуда получается уравнение

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi,$$

которое можно записать в виде

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi(r, t) = 0 \quad (19)$$

с помощью оператора Даламбера $\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$. Между уравнениями (18) и (19) существует то же формальное соответствие, что и между уравнениями (12) и (16).

Уравнение (19), известное как *уравнение Клейна — Гордона*, играет важную роль в релятивистской квантовой теории. Поскольку это уравнение не удовлетворяет критерию Б), оно не может рассматриваться как волновое уравнение без соответствующего изменения интерпретации функции Ψ . Вообще говоря, само утверждение, что волновая функция может представлять динамическое состояние одной и только одной частицы, имеет смысл только в нерелятивистском пределе, когда справедлив закон сохранения числа частиц. Поэтому в дальнейшем мы будем изучать именно нерелятивистское волновое уравнение.

§ 13. Частица в области действия скалярного потенциала

Чтобы образовать волновое уравнение частицы при наличии потенциала $V(r)$, начнем с «приближения геометрической оптики» и попробуем написать уравнение распространения для волнового пакета $\Psi(r, t)$, следующее из теории де Бройля.

Центр пакета перемещается как классическая частица, положение, импульс и энергию которой мы обозначим соответственно как $r_{кл}$, $p_{кл}$ и $E_{кл}$. Эти величины связаны соотношением

$$E_{кл} = H(r_{кл}, p_{кл}) \equiv \frac{p_{кл}^2}{2m} + V(r_{кл}), \quad (20)$$

где $H(r_{кл}, p_{кл})$ есть классическая функция Гамильтона. Предположим, что $V(r)$ явно от времени не зависит (консервативная система), хотя это требование не является существенно необходимым в наших рассуждениях. Следовательно, $E_{кл}$ есть интеграл движения, а $r_{кл}$ и $p_{кл}$ являются вполне определенными функциями времени. В условиях нашего приближения $V(r)$

остается практически постоянным на расстояниях порядка размеров области протяженности волнового пакета; поэтому

$$V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) \approx V(\mathbf{r}_{\text{кл}})\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (21)$$

С другой стороны, если ограничиваться малыми интервалами времени, когда относительные изменения $p_{\text{кл}}$ пренебрежимо малы, то можно рассматривать $\Psi(\mathbf{r}, t)$ как суперпозицию плоских монохроматических волн типа (11), причем частоты близки к $E_{\text{кл}}/\hbar$, а волновые векторы близки к $p_{\text{кл}}/\hbar$. Поэтому можно считать, что

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &\approx E_{\text{кл}} \Psi(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) &\approx p_{\text{кл}}(t) \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (22)$$

а взяв дивергенцию от последнего выражения, получаем

$$-\hbar^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) \approx p_{\text{кл}}^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (23)$$

Комбинируя соотношения (21), (22) и (23) так, чтобы удовлетворить соотношению (20), находим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V\Psi \approx \left(E_{\text{кл}} - \frac{p_{\text{кл}}^2}{2m} - V(\mathbf{r}_{\text{кл}}) \right) \Psi \approx 0.$$

Волновой пакет $\Psi(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет, по крайней мере приближенно, волновому уравнению искомого типа. Мы приходим к естественному выводу, что это уравнение можно принять как уравнение волны частицы при наличии потенциала. Постулируем, что в самом общем случае, даже когда не выполняются условия приближения «геометрической оптики», волна Ψ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (24)$$

Это — уравнение Шредингера для частицы, находящейся в области действия потенциала $V(\mathbf{r})$.

§ 14. Заряженная частица в электромагнитном поле

Предшествующие рассуждения могут быть повторены в более сложных ситуациях, когда, например, потенциал V явно зависит от времени или когда частица с зарядом e движется в электромагнитном поле, описываемом векторным $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и скалярным $\phi(\mathbf{r}, t)$ потенциалами. В последнем случае классическое соотношение (20) следует заменить (см. задачу 1.4) на

$$E = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t). \quad (25)$$

Изучение движения волнового пакета в приближении «геометрической оптики» заставляет нас принять в качестве волнового уравнения следующее:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (26)$$

Это — уравнение Шредингера для заряженной частицы в электромагнитном поле¹⁸⁾.

Уравнения (24) и (26) суть обобщения уравнения (16) и в отношении этих уравнений можно сделать аналогичные замечания. Это линейные однородные уравнения в частных производных первого порядка относительно времени (условия А) и Б)). Они получаются из классических соотношений (20) и (25) с помощью операции соответствия, определенной в (17).

§ 15. Общее правило построения уравнения Шредингера по принципу соответствия

Обобщая операцию соответствия, можно сформулировать метод получения уравнения Шредингера, приложимый в самых общих случаях.

Рассмотрим классическую динамическую систему, уравнения движения которой получаются из функции Гамильтона $H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R; t)$. Эта функция зависит от координат $q_1, \dots, q_R$ системы в пространстве конфигураций, от соответствующих импульсов $p_1, \dots, p_R$ и от времени t . Полная энергия системы есть

$$E = H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R; t). \quad (27)$$

Этой классической системе мы ставим в соответствие квантовую систему, динамическое состояние которой представляется

¹⁸⁾ В правой части уравнения (26) оператор $\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$ есть скалярный квадрат векторного оператора $\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}$; результат действия этого оператора на Ψ есть сумма выражения

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \Psi = \\ = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{e\hbar}{ic} \left(A_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (A_x \Psi) \right) + \frac{e^2}{c^2} A_x^2 \Psi \end{aligned}$$

и двух других выражений, получаемых путем замены x на y и z , или

$$-\hbar^2 \Delta \Psi - 2 \frac{e\hbar}{ic} (\mathbf{A} \nabla \Psi) + \left(-\frac{e\hbar}{ic} \operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{e^2}{c^2} A^2 \right) \Psi.$$

Необходимо учитывать, что составляющие оператора ∇ и оператора $\mathbf{A}$ в общем случае не коммутируют.

волновой функцией $\Psi(q_1, \dots, q_R; t)$, определенной в конфигурационном пространстве. Волновое уравнение получается путем замены в обеих частях соотношения (27)

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p_r \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_r} \quad (r=1, 2, \dots, R). \quad (28)$$

Подразумевается, что результат действия обеих частей равенства (27), рассматриваемых как операторы, на Ψ один и тот же. Запись этого обстоятельства дает *уравнение Шредингера квантовой системы*:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q_1, \dots, q_R; t) = H\left(q_1, \dots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}; t\right) \Psi(q_1, \dots, q_R; t). \quad (29)$$

Оператор $H\left(q_1, \dots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}; t\right)$ называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом* рассматриваемой системы.

Важно отметить, что сформулированное правило соответствия не определяет уравнение Шредингера единственным образом. Имеются две причины, приводящие к неоднозначностям.

Первая причина состоит в том, что указанное выше правило не инвариантно по отношению к замене переменных в конфигурационном пространстве. Проиллюстрируем это обстоятельство на простом примере свободной частицы в пространстве двух измерений. Исходя из функции Гамильтона $\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$ в декартовых координатах, мы получаем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y; t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y; t).$$

Если же перейти к полярным координатам (r, φ) , то нетрудно получить после простых вычислений следующее уравнение для волновой функции $\Psi(r, \varphi; t)$, рассматриваемой как функция полярных координат:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, \varphi; t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi(r, \varphi; t).$$

Если же правило соответствия применить непосредственно в функции Гамильтона, выраженной в полярных координатах $\frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right)$, то мы получим другое уравнение, а именно

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, \varphi; t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi(r, \varphi; t).$$

Чтобы избежать подобной неоднозначности, мы условимся применять правило (28) только в том случае, когда координаты q суть *декартовы координаты*¹⁹⁾.

Вторая причина неоднозначности связана с тем обстоятельством, что согласно правилу (28) мы вместо классических величин, подчиняющихся обычной алгебре, подставляем операторы, которые в общем случае между собой не коммутируют. Поэтому, вообще говоря, эквивалентным формам функции Гамильтона могут соответствовать различные гамильтонианы. Так, двум эквивалентным классическим выражениям для кинетической энергии (одномерная задача), $\frac{p^2}{2m}$ и $\frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}}$ соответствуют операторы $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2}$ и $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{q}} \frac{\partial}{\partial q} q \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\sqrt{q}} \right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{4q^2} \right)$, которые отличаются на величину $\hbar^2/8mq^2$.

Никакое правило, основанное на соответствии с классической механикой, не может разрешить этих противоречий, ибо они проистекают из некоммутативности операторов, которая, в свою очередь, связана с существованием кванта действия $\hbar$. Следует поэтому фиксировать форму функции Гамильтона эмпирическим путем. Во всех случаях, имеющих практический интерес, надлежит действовать согласно следующим предписаниям.

В декартовых координатах функция Гамильтона представляется в виде суммы следующих членов: квадратичной по p формы (не зависящей от q), некоторой функции, зависящей только от q , и, возможно, линейной по p функции вида $\sum_i p_i f_i(q_1, \dots, q_R)$. Если функция Гамильтона приведена в этом виде, то последний член в сумме заменяется на «симметризованное» выражение $\frac{1}{2} \sum_i [p_i f_i(q_1, \dots, q_R) + f_i(q_1, \dots, q_R) p_i]$,

а затем применяется правило соответствия (28).

«Симметризация» членов, линейных по p , как мы увидим в гл. IV, есть необходимое условие согласованности статистического истолкования волновой функции. Примером системы, при

¹⁹⁾ Это условие не произвольно. Оно автоматически обеспечивает инвариантность формы уравнения Шредингера при повороте осей координат. Можно впрочем снять это ограничение и сформулировать правило соответствия в ковариантной форме, вводя подходящую метрику в конфигурационном пространстве и заменяя в (28) операцию $\partial/\partial q$ на операцию ковариантного дифференцирования (см. по этому поводу: *L. Brillouin, Les Tenseurs en Mécanique et en Elasticité, Masson, Paris, 1938, p. 200*; см. также: *В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, М. 1947, с. 68*).

рассмотрении которой необходима указанная манипуляция, является частица в электромагнитном поле (уравнения (25) и (26)).

Закончим этот параграф важным примером. Напишем уравнение Шредингера для сложного атома, состоящего из ядра с зарядом Ze и массой M и Z электронов с зарядом $-e$ и массой m . Функция Гамильтона включает $Z + 1$ членов кинетической энергии, Z членов кулоновского взаимодействия электронов с ядром и $\frac{1}{2} Z(Z - 1)$ членов кулоновского отталкивания между парами электронов, т. е.

$$\frac{P^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|R - r_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}.$$

Отсюда мы получаем уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(R, r_1, \dots, r_Z; t) = \left[-\hbar^2 \left(\frac{\Delta_R}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{\Delta_i}{2m} \right) - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|R - r_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right] \Psi, \quad (30)$$

где оператор Δ_R есть оператор Лапласа по отношению к вектору R (т. е. $\partial^2/\partial X^2 + \partial^2/\partial Y^2 + \partial^2/\partial Z^2$), а оператор Δ_i есть оператор Лапласа по отношению к радиусу-вектору i -го электрона.

В частности, в случае атома водорода ($Z = 1$) уравнение записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_p, r_e; t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_p - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_e - \frac{e^2}{|r_p - r_e|} \right) \Psi(r_p, r_e; t) \quad (31)$$

(здесь M — масса протона, r_p — его радиус-вектор, а r_e — радиус-вектор электрона). В первом приближении можно считать, что протон имеет бесконечную массу, и рассматривать атом водорода как электрон, находящийся в притягивающем кулоновском поле $-e^2/r$, причем r обозначает положение электрона в системе координат, начало которой совпадает с положением протона (по предположению — неподвижного). Волновая функция электрона удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right) \Psi(r, t). \quad (32)$$

Раздел III. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

§ 16. Исследование стационарных состояний

Уравнение Шредингера квантовой системы формально записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi. \quad (33)$$

Предположим, что гамильтониан H от времени явно не зависит. Это случай консервативных систем, соответствующих классическим системам, для которых энергия есть интеграл движения. Образует решение Ψ , представляющее динамическое состояние с определенной энергией E .

Такая волновая функция Ψ должна обладать вполне определенной круговой частотой ω , соответствующей соотношению Эйнштейна $E = \hbar\omega$. Напомним, что это соотношение между частотой волны и энергией системы составляет основной постулат теории волн вещества. Функция Ψ записывается в виде

$$\Psi = \psi e^{-i \frac{Et}{\hbar}}, \quad (34)$$

где ψ зависит от координат в конфигурационном пространстве, но не зависит от времени. Подставляя это выражение в уравнение (33), получаем уравнение

$$H\psi = E\psi, \quad (35)$$

которое обычно называется уравнением Шредингера, не зависящим от времени, или *стационарным уравнением Шредингера*.

Когда система представляется волновой функцией (34), говорят, что она находится в *стационарном состоянии с энергией E* , а волновая функция ψ , не зависящая от времени, обычно называется волновой функцией стационарного состояния, хотя она отличается от истинной волновой функции фазовым множителем $e^{-i \frac{Et}{\hbar}}$.

§ 17. Общие свойства уравнения. Структура энергетического спектра

Чтобы облегчить изложение, продолжим обсуждение на частном примере частицы с массой m при наличии скалярного потенциала $V(\mathbf{r})$. Предположим, кроме того, что $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$, когда $r \rightarrow \infty$. Функция ψ зависит от вектора $\mathbf{r}(x, y, z)$, фиксирующего положение частицы, а уравнение Шредингера, не зависящее от

времени, запишется в виде

$$H\psi(r) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (36)$$

На языке теории уравнений с частными производными уравнение типа (36) называется *уравнением на собственные значения*. Решение $\psi_E(r)$ этого уравнения есть *собственная функция*, соответствующая собственному значению E оператора H .

В действительности задача на собственные значения определена только если сформулированы условия «регулярности» и граничные условия, которым должна удовлетворять функция ψ . Условия, накладываемые на функцию $\psi(r)$, должны, конечно, согласовываться с общей интерпретацией волновой функции. Мы вернемся в этой теме в гл. IV. Потребуем здесь, чтобы функция и ее частные производные первого порядка были *непрерывными* и *ограниченными* функциями во всем пространстве.

В этом случае можно доказать справедливость следующих результатов, которые мы примем как данные, но будем иметь возможность проверить их на многочисленных примерах.

а) Если $E < 0$, то уравнение (36) имеет решения только при некоторых определенных значениях E , образующих *дискретный спектр*. Собственная функция для любого собственного значения (или каждая функция, если их несколько) обращается в нуль на бесконечности. Точнее говоря, интеграл $\int |\psi(r)|^2 dr$, распространенный на все конфигурационное пространство, сходится. Согласно статистической интерпретации это значит, что вероятность найти частицу на бесконечности равна нулю, частица остается локализованной в конечной области пространства. Говорят, что частица находится в *связанном состоянии*.

б) Если $E > 0$, то уравнение (36) может иметь решения при любых положительных значениях E . Говорят, что положительные энергии образуют *непрерывный спектр*. Соответствующие собственные функции не обращаются в нуль на бесконечности, их асимптотическое поведение аналогично поведению плоской волны e^{ikr} . Точнее говоря, модуль $|\psi(r)|$ стремится к конечной постоянной или осциллирует между значениями, из которых по крайней мере одно отлично от нуля. Частица не остается локализованной в конечной области. Волновые функции этого типа служат для описания задач столкновения; говорят, что мы имеем дело с частицей в *несвязанном состоянии*, или в стационарном состоянии рассеяния.

Таким образом, мы получаем первый фундаментальный результат: квантование уровней энергии связанных состояний, т. е. один из самых впечатляющих экспериментальных фактов,

обусловивших крушение классической теории. Определение квантованных уровней энергии представляется здесь как задача нахождения собственных значений. Решение этой задачи с наибольшей возможной степенью точности является одной из центральных задач волновой механики. Для некоторых особенно простых форм гамильтониана задача может быть решена строго. Именно таким является случай атома водорода (мы рассмотрим его подробно в гл. XI), когда уровни энергии оказываются собственными значениями оператора $[-(\hbar^2/2m)\Delta - e^2/r]$. Получаемый спектр совпадает с тем, который предсказывала старая квантовая теория; мы уже имели случай подчеркнуть удивительное совпадение этого спектра с экспериментальными данными. В более сложных ситуациях следует использовать различные приближенные методы. Но во всех случаях, когда удавалось вычислить спектр энергий с достаточной степенью точности, согласие с опытом оказалось настолько хорошим, насколько этого вообще можно было ожидать от нерелятивистской теории.

Сама собственная функция ψ_E может быть подвергнута в определенной мере экспериментальной проверке. Действительно, собственные функции дискретного спектра используются при вычислениях различных наблюдаемых величин, например, вероятностей квантовых переходов. Что же касается собственных функций непрерывного спектра, то их асимптотическая форма непосредственно связана с эффективными сечениями, характеризующими явления рассеяния, что будет подробно выяснено в дальнейшем. В области нерелятивистской атомной физики до сих пор не было обнаружено ни одного случая расхождения между предсказаниями волновой механики и экспериментальными данными.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. В эксперименте пытаются наблюдать за движением электрона по круговой боровской орбите атома водорода, измеряя последовательные положения электрона с помощью достаточно жестких рентгеновских лучей.

Оценить порядок величины передачи кинетической энергии электрону ΔT при столкновении с рентгеновским фотоном в зависимости от длины волны последнего. Чтобы можно было наблюдать движение вдоль орбиты, необходимо, во всяком случае, чтобы λ была значительно меньше радиуса орбиты. Сравнить в этом случае ΔT с расстоянием между соседними уровнями. Что можно сказать о возможности наблюдения боровских орбит?

2. В релятивистской механике полная энергия E и импульс p свободной частицы с массой покоя m и скоростью v равны соответственно
$$\frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

и $\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$. Проверить, что уравнения движения могут быть записаны в гамильтоновой форме, если в качестве функции Гамильтона взять величину $H = E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$.

Получить равенство скорости этой частицы и групповой скорости v_g ассоциированной волны де Бройля. Вычислить фазовую скорость v_φ этой волны; показать, что она превосходит скорость света c и что $v_g v_\varphi = c^2$.

3. Проверить обоснованность классического описания движения атома в двухатомной молекуле. Для этого, предполагая, что атом совершает гармонические колебания с круговой частотой ω и средней кинетической энергией порядка $\frac{1}{2}kT$, сравнить среднюю длину волны атома с амплитудами этих колебаний. Рассмотреть сначала случай молекулы водорода в условиях обычных температур: $T = 300^\circ\text{K}$, $kT = 0,025 \text{ эв}$, $\hbar\omega = 0,5 \text{ эв}$, а затем случай молекулы из тяжелых атомов с массой в 200 масс водорода, предполагая, что возвращающая сила в обоих случаях одинакова. Сделать это для $T = 300^\circ\text{K}$ и $T = 10^\circ\text{K}$.

4. Электрон движется по круговой траектории в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$. Применить для этого вращательного движения условие резонанса де Бройля. Показать, что кинетическая энергия электрона квантуется, уровни энергии эквидистантны и расстояние между ними равно $(e\hbar/mc)\mathcal{H}$ — этот результат отличается от результата строгой квантовой теории только смещением всех уровней на величину $(e\hbar/2mc)\mathcal{H}$. Вычислить радиус орбит, количество движения и кинетическую энергию квантованных траекторий для поля в 10^4 гс . Сравнить радиус орбиты с квантовым числом единица с радиусом боровской орбиты атома водорода в основном состоянии. *Примечание.* Следует различать импульс p и количество движения mv в этой задаче. Если A есть векторный потенциал поля, то

$$p = mv + (e/c)A.$$

5. Используя тот факт, что произвольная волна может рассматриваться как суперпозиция плоских волн, показать, что в отсутствие поля волна вещества $\Psi(r_2, t_2)$ в точке r_2 в момент t_2 может быть получена из значений $\Psi(r_1, t_1)$, взятых в момент t_1 , с помощью операции

$$\Psi(r_2, t_2) = \int K(r_2 - r_1; t_2 - t_1) \Psi(r_1, t_1) dr_1, \quad (1)$$

где

$$K(p; \tau) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p\rho - E\tau)} d\rho.$$

В этом выражении E как функция p равна энергии соответствующей частицы с импульсом p . Показать, что для нерелятивистской частицы с массой m

$$K(p; \tau) = e^{-\frac{3\pi i}{4}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} e^{i \frac{m\rho^2}{2\hbar\tau}}.$$

Вывести отсюда, что главный вклад в интеграл (1) дает область, около точки r_2 с линейным размером порядка $\left(\frac{2\hbar(t_2 - t_1)}{m}\right)^{1/2}$.

6. Как изменить метод решения предыдущей задачи, чтобы он мог быть применен к случаю частицы в одном измерении? Пользуясь этим методом, найти волновую функцию в момент времени t свободной нерелятивистской частицы массы m , если волновая функция в момент $t = 0$ есть

$$\psi(x, 0) = (\pi\xi_0^2)^{-1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-x^2/2\xi_0^2}.$$

Интенсивность (квадрат модуля) этой волны в момент $t = 0$ выражается гауссовой кривой ширины ξ_0 . Показать, что форма кривой интенсивности остается гауссовой в любой последующий момент времени, но ширина кривой увеличивается согласно закону

$$\xi = \xi_0 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \xi_0^4}\right)^{1/2}$$

(расплывание волнового пакета).

§ 1. Введение

Чтобы познакомиться ближе с уравнением Шредингера до рассмотрения проблем истолкования и интерпретации квантовой теории, мы изучим волновую механику физических систем в одном измерении. Одномерные задачи интересны не только как простые модели, позволяющие обнаружить некоторые особенности, которые встретятся нам в более сложных случаях, но также и потому, что многие задачи после соответствующих преобразований могут быть сведены к проблеме решения уравнений, аналогичных одномерному уравнению Шредингера.

Рассмотрим частицу массы m , способную перемещаться по оси x под действием некоторого потенциала $V(x)$. Уравнение Шредингера записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t). \quad (1)$$

Мы займемся исследованием стационарных состояний. Если E есть энергия стационарного состояния, то

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

причем функция $\psi(x)$ является решением стационарного уравнения Шредингера,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi = E\psi. \quad (3)$$

В этой главе мы используем обозначения

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} U(x), \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon, \quad (4)$$

что позволяет переписать предшествующее уравнение в форме

$$\psi'' + (\varepsilon - U(x)) \psi = 0. \quad (5)$$

Это дифференциальное уравнение Штурма — Лиувилля; мы интересуемся ограниченными, непрерывными и дифференцируемыми его решениями во всем интервале $(-\infty, +\infty)$.

Если такое решение существует, то всякое другое решение, получаемое умножением на постоянный коэффициент, будет обладать аналогичными свойствами, поэтому мы не будем различать решения, отличающиеся на постоянный множитель. Если допустимы два линейно независимых решения, то всякая их линейная комбинация также будет допустимым решением. В этом случае говорят, что собственное значение имеет *вырождение кратности или порядка 2*; по определению кратность или порядок вырождения есть число линейно независимых собственных функций, принадлежащих данному собственному значению.

Уравнение (5) вещественно ($V(x)$ есть вещественная функция x). Если ψ есть собственная функция, то ее действительная и мнимая части также являются собственными функциями (в случае отсутствия вырождения они отличаются только на постоянный множитель). Поэтому для нахождения всех собственных функций, соответствующих данному собственному значению, достаточно знать все действительные собственные функции. Это замечание существенно упрощает вычисления.

В первом разделе мы рассмотрим точно решаемую задачу на собственные значения в случае некоторых прямоугольных потенциалов. Особенное внимание будет обращено на различия между квантовыми и классическими движениями, а именно на квантование уровней энергии связанных состояний и явления отражения волн, резонанса и прохождения потенциальных барьеров несвязанными «частицами». Во втором разделе мы подвергнем систематическому изучению уравнение (5) для произвольного потенциала $U(x)$. Это позволит нам распространить на общий случай некоторые результаты, полученные в первом разделе.

Раздел I. ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

§ 2. Общие свойства

Для проявления типично квантовых эффектов необходимо, чтобы потенциал $U(x)$ заметно изменялся на расстояниях порядка длины волны. Наиболее простым типом потенциала, отвечающего этому требованию, является прямоугольный потенциал: это потенциал, обладающий разрывами непрерывности первого рода (т. е. резкими скачками конечной величины) в некоторых точках, а между этими точками постоянный. Ось x таким образом подразделяется на некоторое число интервалов, в каждом из которых потенциал имеет вполне определенное постоянное значение.

Наличие разрывов первого рода у потенциала $U(x)$ не изменяет условия регулярности, которым должна удовлетворять

функция ψ . Действительно, согласно уравнению Шредингера,

$$\psi'' = (U - \varepsilon)\psi.$$

Следовательно, в точках скачков потенциала функция ψ'' также разрывна, но первообразная ψ' , а также ψ остаются всюду непрерывными функциями.

Пусть теперь U_i есть значение (постоянное) потенциала $U(x)$ в i -ом интервале ($i = 1, 2, \dots, n$). Общее решение в этой области есть линейная комбинация экспоненциальных функций. Но поведение решения существенно зависит от знака $\varepsilon - U_i$.

Если $\varepsilon > U_i$, то мы имеем комбинацию экспонент с мнимыми показателями: $e^{ik_i x}$ и $e^{-ik_i x}$ ($k_i = \sqrt{\varepsilon - U_i}$), т. е. фактически комбинацию синуса и косинуса; поведение решения имеет «осцилляторный» характер.

Если же $\varepsilon < U_i$, то имеет место комбинация действительных экспонент $e^{\kappa_i x}$ и $e^{-\kappa_i x}$ ($\kappa_i = \sqrt{U_i - \varepsilon}$). В этом случае мы говорим, что решение имеет «экспоненциальный» характер поведения.

Чтобы написать общее решение дифференциального уравнения, сначала выражают его в виде линейной комбинации экспонент (действительных или мнимых) в каждом из n интервалов. Параметры этих комбинаций (число их равно $2n$) находятся из условий непрерывности функции и ее производной в точках разрыва непрерывности потенциала. Это дает $2(n-1)$ условий, поскольку имеется $n-1$ точка разрыва. Общее решение таким образом, оказывается зависящим от двух произвольных параметров, что и следовало ожидать. Чтобы получаемое решение было собственной функцией необходимо, чтобы оно было ограничено на всей оси, т. е. оказывалось ограниченным в каждом из пределов $x \rightarrow +\infty$ и $x \rightarrow -\infty$. Заметим, что если энергия ε меньше значения потенциала во всем интервале $(-\infty, +\infty)$, то общее решение всюду имеет экспоненциальный характер. Вторая производная ψ'' всюду имеет тот же знак, что и сама функция ψ . Отсюда нетрудно вывести, что общее решение экспоненциально растет при $x \rightarrow -\infty$ или $x \rightarrow +\infty$ или же в обоих случаях. Задача на собственные значения при этом не имеет решения. Отметим, что и в классической механике движение возможно только, если энергия превосходит значение потенциала хотя бы в некоторой части интервала $(-\infty, +\infty)$.

Если ε превосходит хотя бы одну из величин U_i , то существование и число собственных функций зависят от характера поведения (осцилляторного или экспоненциального) общего решения в двух бесконечно удаленных концах оси x .

§ 3. Скачок потенциала. Отражение и прохождение волн

Простейшим примером прямоугольного потенциала является резкий скачок потенциала ($n = 2$), представленный на рис. 8.

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & \text{если } x > 0 \text{ (область I),} \\ U_2, & \text{если } x < 0 \text{ (область II).} \end{cases}$$

Будем считать для определенности, что $U_2 > U_1$.

Возможны два случая:

а) $U_2 > \varepsilon > U_1$. Общее решение имеет осцилляторный характер в области I ($x > 0$) и экспоненциальный характер в области II ($x < 0$). Чтобы это решение могло явиться приемлемой собственной функцией необходимо, чтобы в области II оно было экспоненциально затухающим. Всегда существует одно и только одно решение, удовлетворяющее этому условию. Каждое значение ε в указанном интервале является невырожденным собственным значением: спектр энергии *непрерывный невырожденный*. Общее решение имеет вид:

$$y = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \varphi) & x > 0, \\ A_2 e^{\kappa_2 x} & x < 0. \end{cases} \quad (6)$$

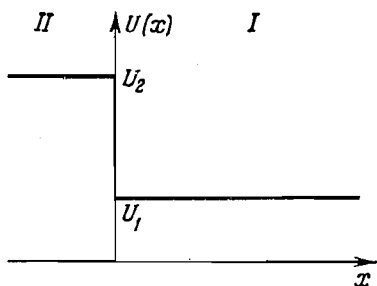


Рис. 8. Скачок потенциала.

Условия непрерывности определяют y с точностью до постоянной. Вместо того, чтобы рассматривать непрерывность функции и ее производной, удобнее потребовать непрерывности функции и ее *логарифмической производной* y'/y . Непрерывность логарифмической производной определяет фазу

$$k_1 \operatorname{ctg} \varphi = \kappa_2;$$

φ определяется с точностью до слагаемого $n\pi$, так как замена φ на $\varphi + \pi$ эквивалентна замене знака амплитуды A_1 . Примем для φ значение

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{k_1}{\kappa_2}. \quad (6a)$$

причем arctg выражает значения этой функции в интервале $(-\pi/2, +\pi/2)$.

Непрерывность функции определяет отношение A_2/A_1 , именно

$$\frac{A_2}{A_1} = \sin \varphi = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_1}{U_2 - U_1}}. \quad (66)$$

б) $\varepsilon > U_2$. Общее решение имеет осцилляторный характер во всем пространстве и является поэтому допустимой собственной функцией. Каждому значению ε соответствуют две линейно независимые собственные функции; спектр собственных значений *непрерывный двукратно вырожденный*.

Образуем собственную функцию, поведение которой в области II имеет вид e^{-ik_2x} . Она определяется с точностью до постоянной, которую мы выберем так, чтобы коэффициент при члене e^{-ik_1x} в области I был равен единице. Иначе говоря

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + Re^{ik_1x} & x > 0, \\ Se^{-ik_2x} & x < 0. \end{cases} \quad (7)$$

Постоянные (вообще говоря, комплексные) R и S определяются условиями непрерывности в точке $x = 0$. Непрерывность логарифмической производной дает

$$R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad (7a)$$

а непрерывность самой функции —

$$S = 1 + R = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (7б)$$

Комплексно сопряженная функция χ^* есть собственная функция, линейно независимая с χ . Все собственные функции, соответствующие собственному значению ε , могут быть записаны как линейные комбинации χ и χ^* .

Сравним полученные результаты с теми, которые дает классическая механика. Движение классической частицы в рассматриваемом потенциале различно в случаях а) и б).

В случае а) классическое движение соответствует движению частицы с энергией $(\hbar^2/2m)\varepsilon$. Частица, приходя из $+\infty$, пробегает положительную полуось с постоянной скоростью $\hbar k_1/m$ в направлении уменьшения x , затем упруго отражается от точки $x = 0$ и уходит обратно с той же скоростью в бесконечность. Чтобы описать аналогичное движение в волновой механике, следует построить волновой пакет из волн типа $ye^{-iEt/\hbar}$ с близкими энергиями. Вместо функции (6) удобнее использовать волну

$$\psi_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x} - e^{i(k_1x+2\varphi)} & x > 0, \\ \frac{2A_2}{iA_1} e^{i\varphi} e^{k_2x} & x < 0, \end{cases} \quad (8)$$

получаемую, если y разделить на $\frac{1}{2} iA_1 e^{-i\varphi}$; мы пишем индекс ε , чтобы указать, что это собственная функция, соответствующая

собственному значению ϵ . Рассмотрим волновой пакет

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) \psi_{\epsilon'}(x) e^{-iE't/\hbar} dk'_1. \quad (9)$$

Функция $f(k'_1 - k_1)$ есть достаточно регулярная действительная функция k'_1 , обладающая резким максимумом при $k'_1 = k_1$ (штрих у k'_1 здесь не имеет отношения к производной по x ; смысл величин k'_1 , ϵ' , E' и их взаимные связи очевидны). Дабы устранить ненужные сложности, примем, кроме того, что $f(k'_1 - k_1)$ обращается в нуль при $k_1'^2 > U_2 - U_1$. Таким образом, функция $\Psi(x, t)$ образована суперпозицией собственных функций случая а) с характерным множителем $e^{-iE't/\hbar}$, учитывающим зависимость от времени. По самому построению Ψ является решением уравнения Шредингера, зависящего от времени. Нетрудно представить себе, как эта функция меняется во времени, если обратиться к исследованию свободных волновых пакетов (гл. II).

В области I решение $\Psi(x, t)$ есть суперпозиция двух величин: «падающего волнового пакета»

$$\Psi_l(x, t) = \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) e^{-ik'_1 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1, \quad (10a)$$

центр которого $-(1/\hbar)(dE/dk_1)t = -v_1 t$ перемещается со скоростью $v_1 = \hbar k_1/m$ в отрицательном направлении и достигает точки $x = 0$ в момент $t = 0$, и «отраженного волнового пакета»

$$\Psi_r(x, t) = - \int_0^{\infty} f(k'_1 - k_1) e^{i(k'_1 x + 2\varphi')} e^{-iE't/\hbar} dk'_1, \quad (10b)$$

центр которого $x = v_1 t - 2d\varphi/dk_1$ перемещается со скоростью v_1 в противоположном направлении и покидает начало координат в момент

$$\tau = \frac{2}{v_1} \frac{d\varphi}{dk_1} = 2\hbar \frac{d\varphi}{dE}, \quad (11)$$

который отличается от момента $t = 0$ прихода «падающего волнового пакета» в точку $x = 0$. Движение центра волнового пакета, таким образом, почти идентично движению классической частицы. Единственное отличие состоит в запаздывании τ , которое обнаруживает центр пакета при отражении от точки разрыва непрерывности потенциала $x = 0$, тогда как отражение классической частицы происходит мгновенно. Заметим по этому поводу, что само рассмотрение движения центра пакета имеет

смысл только, если форма пакета не слишком меняется за время движения. Это условие выполняется в случае падающего волнового пакета, пока его центр отстоит от начала координат на расстоянии, большем, чем ширина пакета Δx . Чтобы то же условие выполнялось для отраженного волнового пакета необходимо, кроме того, чтобы ширина Δk максимума функции f была достаточно малой. При этом фаза φ не меняется заметно в области, дающей наибольший вклад в интеграл (9), если $\Delta k(d\varphi/dk_1) \ll 1$. Поскольку пространственные размеры Δx пакета порядка $1/\Delta k$, это условие можно записать в виде

$$\Delta x \gg \frac{d\varphi}{dk_1}. \quad (12)$$

Следовательно, $\Delta x/v_1 \gg \tau$. Пакет волн настолько широк, что время, за которое он пересекает весь некоторую точку на оси, значительно больше запаздывания, вызванного отражением.

Помимо запаздывания τ имеется еще одно отличие между движением классической частицы и отражением квантового волнового пакета. Волна Ψ не всегда равна нулю в области II. Исследование, аналогичное вышеприведенному, показывает, что Ψ равна произведению фактора $2A_2 e^{ik_2 x}/A_1$ на величину, принимающую заметные значения в промежуток времени, близкий моменту $t = \tau/2$; этот промежуток можно рассматривать как время столкновения с потенциальной «стенкой» в точке $x = 0$. Таким образом, в этот момент времени существует отличная от нуля вероятность найти частицу в области II, в то время как классическая частица никогда не проникает в эту область.

Рассмотрим теперь случай б). В этом случае имеются два возможных классических движения, соответствующих одному значению энергии¹⁾. В одном частица пробегает всю ось от $+\infty$ до $-\infty$, причем ее скорость, постоянная и равная $v_1 = \hbar k_1/m$ в области I, меняется скачком от v_1 до $v_2 = \hbar k_2/m$ в точке разрыва непрерывности потенциала; в дальнейшем частица движется со скоростью v_2 до $-\infty$. Другое возможное движение есть в точности противоположное движение частицы, пробегающей ось x в положительном направлении со скоростью v_2 в области II и скоростью v_1 в области I.

Сравним эти классические движения с движениями волновых пакетов, находящихся в тех же начальных условиях. Сделаем это для первого из движений (перемещение в отрицательном направлении). Действуя соответственно случаю а), образуем волновой пакет, аналогичный формуле (9), как суперпозицию собственных функций, соответствующих собственным

¹⁾ Этот факт следует сравнить с наличием двукратного вырождения в соответствующей квантовой задаче.

значениям, близким ε . Снабдим собственную функцию χ типа (7) индексом ε , чтобы отметить, что она зависит от энергии. *A priori* пакет должен включать суперпозицию функций χ_ε и χ_ε^* . Но чтобы осуществить желаемые начальные условия, пакет должен содержать только функции χ_ε , что будет видно из дальнейшего. Запишем поэтому

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) \chi_\varepsilon(x) e^{-iE'/\hbar} dk'_1.$$

Единственное отличие от формулы (9) состоит в том, что максимум $k_1 = \sqrt{\varepsilon - U_1}$ функции f находится в области энергий б), а не в области а). Эволюция волнового пакета во времени исследуется аналогично формуле (9) и дает следующие результаты.

Мы констатируем, что начальные условия удовлетворяются, а именно при $t \ll 0$ функция $\Psi(x, t)$ практически равна нулю в области II, а в области I заметный вклад дает только член e^{-ik_1x} , т. е. мы получаем волновой пакет, центр которого $x = -v_1 t$ перемещается как классическая частица со скоростью v_1 в направлении уменьшения x и достигает начала в момент $t = 0$. В дальнейшем $\Psi(x, t)$ разделяется на два пакета: «проходящий волновой пакет»

$$\Psi_t(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) S' e^{-ik'_2 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1,$$

центр которого $x = -v_2 t$ строго следует движению классической частицы, и «отраженный волновой пакет»

$$\Psi_r(x, t) = \int_0^\infty f(k'_1 - k_1) R' e^{ik'_1 x} e^{-iE't/\hbar} dk'_1,$$

центр которого $x = v_1 t$ движется так, как классическая частица, претерпевшая упругое отражение в точке $x = 0$. Существует, таким образом, очень важное отличие от классического движения: *квантовая «частица» имеет отличную от нуля вероятность «отразиться» при прохождении точки разрыва потенциала.* Чтобы продолжить этот анализ, следует уточнить эту вероятность, что будет сделано в гл. IV. Отметим здесь без доказательства, что вероятность найти частицу в отраженной волне равна $|R|^2$, а вероятность найти ее в прошедшей волне равна $(k_2/k_1) |S|^2$ (см. задачу IV.2). Эти результаты согласованы, так как сумма этих двух величин равна единице

$$|R|^2 + \frac{k_2}{k_1} |S|^2 = 1, \quad (13)$$

что легко проверить, подставляя в это уравнение выражения (7а) и (7б).

Величина

$$T = \frac{k_2}{k_1} |S|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (14)$$

называется *коэффициентом прохождения*. Эта величина растет с энергией и стремится к 1, когда $\varepsilon \rightarrow \infty$. Можно сказать, что в этом пределе мы получаем результат классической механики.

Можно заметить, что T есть симметричная функция k_1 и k_2 . Следовательно, волна той же энергии, но распространяющаяся в противоположном направлении (от области II к области I), имеет одинаковый коэффициент прохождения: он не зависит от направления движения.

Все эти результаты не могут очень удивить, если принять во внимание аналогию с распространением световой волны. Рассматриваемая выше задача вполне эквивалентна задаче о распространении светового сигнала в непоглощающей среде с переменным показателем преломления. В случае а) показатель переходит от действительного значения (среда I) к значению мнимому (среда II) в точке $x = 0$: имеет место полное отражение. В случае б) показатель остается действительным, но значения его в средах I и II различны: резкое изменение показателя сопровождается частичным отражением.

§ 4. Бесконечно высокий потенциальный барьер

Предельным случаем предшествующей задачи является задача о частице, встречающей бесконечно высокий потенциальный барьер. Предположим для определенности, что $U(x) = +\infty$, когда $x < 0$. Мы находимся в ситуации, аналогичной случаю а), когда $U_2 \rightarrow +\infty$. Из формул (6), (6а), (6б) в этом предельном случае ($k_2 \rightarrow \infty$) следует, что волна обращается в нуль в точке $x = 0$.

Это общий результат, не зависящий от формы функции $U(x)$ в области $x > 0$. Действительно, волновая функция в области $x < 0$ по необходимости принимает форму $Ae^{\kappa_2 x}$, ее логарифмическая производная есть κ_2 . В пределе, когда потенциал V_2 стремится к бесконечности, κ_2 также становится бесконечным. Значит функция должна иметь бесконечную логарифмическую производную в точке $x = 0$, т. е., иными словами, обратиться в нуль.

Таким образом, в предельном случае бесконечно высокого потенциального барьера волновая функция должна обращаться в нуль на границе этого барьера.

§ 5. Бесконечно глубокая потенциальная яма. Дискретный спектр

В качестве второго простого примера мы рассмотрим случай бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы. Значение потенциала на дне ямы будем считать началом отсчета значений энергии. Эта область нулевого потенциала занимает некоторый участок оси $(-L/2, +L/2)$; с обеих сторон интервал ограничен бесконечно высокими потенциальными барьерами (рис. 9).

Задача о собственных значениях сводится к нахождению функции ψ , обращающейся в нуль в точках $+L/2$ и $-L/2$ и удовлетворяющей в интервале $(-L/2, +L/2)$ уравнению Шредингера

$$\psi'' + \varepsilon\psi = 0.$$

Общее решение есть линейная комбинация $\sin kx$ и $\cos kx$ ($k = \sqrt{\varepsilon}$). Решения, одновременно удовлетворяющие двум граничным условиям, существуют только при некоторых дискретных значениях ε , а именно:

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (15)$$

(решения, для которых $kL = n\pi$). Каждому из этих значений ε_n соответствует одна и только одна собственная функция (вырождения нет), а именно:

$$\psi_n = \cos \frac{n\pi}{L} x \quad \text{при } n \text{ нечетном,} \quad (16a)$$

$$\psi_n = \sin \frac{n\pi}{L} x \quad \text{при } n \text{ четном.} \quad (16б)$$

Этот простой результат вызывает целый ряд общих замечаний. Во-первых, данный результат принципиально отличается от результата классической механики. В том же потенциале классическая частица может двигаться при любой положительной энергии. Это будет периодическое движение туда и обратно между двумя потенциальными стенками, находящимися на концах интервала $(-L/2, +L/2)$. В квантовой механике движение

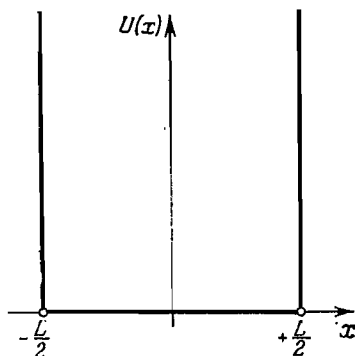


Рис. 9. Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма.

может иметь место только при некоторых определенных дискретных значениях энергии²⁾: *энергия частицы квантуется*.

Второе замечание касается *четности* собственных функций³⁾. Функции четные, если n нечетно (уравнение (16a)), и нечетные, если n четно (уравнение (16b)). То обстоятельство, что собственные функции обладают определенной четностью, связано со свойствами потенциала, который является четной функцией относительно начала координат:

$$U(x) = U(-x).$$

Проблема четности во всей полноте будет рассмотрена в § 14.

Последнее замечание относится к *числу узлов* собственных функций. По определению узлы суть точки, в которых функция обращается в нуль (за исключением нулей на концах интервала $-L/2 + L/2$). Число узлов монотонно растет с ростом собственного значения энергии, оно увеличивается на единицу при переходе от некоторого собственного значения к ближайшему последующему: собственная функция основного состояния ψ_1 не имеет узлов, ..., собственная функция $n-1$ -го возбужденного состояния ψ_n имеет $n-1$ узел и т. д. Полезно подчеркнуть аналогию с числом узлов стационарных состояний закрепленной на концах колеблющейся струны. Сходство здесь полное, так как математически обе задачи тождественны.

§ 6. Конечная потенциальная яма. Резонансы

Результаты, полученные нами на примерах скачка потенциала и бесконечно глубокой потенциальной ямы, помогут нам рассмотреть более сложные случаи. В качестве нового примера возьмем потенциал, изображенный на рис. 10. Здесь функция $U(x)$ принимает вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & x > a & (\text{область I}), \\ U_2 & a > x > b & (\text{область II}), \\ U_3 & b > x & (\text{область III}), \end{cases}$$

причем $U_2 < U_1 < U_3$.

Задача о собственных значениях представляется различной в зависимости от величины ϵ по сравнению с постоянными U_1 , U_2 и U_3 .

а) $U_2 < \epsilon < U_1$. *Дискретный спектр и связанные состояния*.

²⁾ Период классического движения равен $\hbar/\Delta E$, где ΔE — расстояние между ближайшими уровнями, в согласии с принципом соответствия.

³⁾ Функция $f(x)$ есть четная функция, если $f(x) = f(-x)$, и нечетная, если $f(x) = -f(-x)$.

Общее решение ведет себя экспоненциально во внешних областях I и III, а во внутренней области характер его поведения осцилляторный. Чтобы быть приемлемым в качестве собственной функции, решение должно экспоненциально затухать в обеих внешних областях. Существует одно и только одно решение, экспоненциально затухающее в области I, а также одно и только одно решение, затухающее в области III; эти два решения согласованно сшиваются только при некоторых определенных дискретных значениях ϵ . Мы делаем заключение, что энергетический спектр по необходимости дискретен и не вырожден.

Функция ψ , по предположению вещественная (ср. стр. 85), в каждой из трех областей имеет вид:

$$\varphi = \begin{cases} A_1 e^{-\kappa_1 x} & x > a, \\ A_2 \sin(k_2 x + \varphi) & a > x > b, \\ A_3 e^{\kappa_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (17)$$

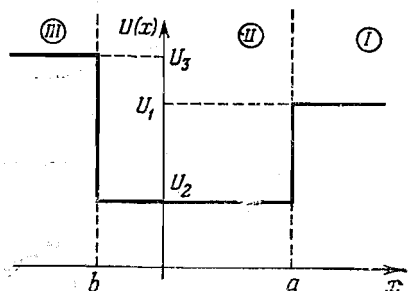


Рис. 10. Конечная прямоугольная потенциальная яма.

Если фаза φ известна, то два условия непрерывности функции определяют постоянные A_1 , A_2 , A_3 (с точностью до постоянного множителя).

Что же касается φ , то она должна удовлетворять одновременно двум условиям непрерывности логарифмических производных:

$$k_2 \operatorname{ctg}(k_2 a + \varphi) = -\kappa_1, \quad k_2 \operatorname{ctg}(k_2 b + \varphi) = \kappa_3; \quad (18)$$

иными словами

$$\begin{aligned} \varphi &= -k_2 a - \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_1} + n\pi \quad (n - \text{целое положительное}), \\ \varphi &= -k_2 b + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3} \end{aligned} \quad (19)$$

(φ определяется с точностью до слагаемого $n\pi$; мы требуем, чтобы $k_2 b + \varphi$ находилось в интервале $(-\pi/2; +\pi/2)$). Это возможно в том и только в том случае, когда правые части двух последних уравнений равны. Указанное равенство может быть реализовано только при некоторых дискретных значениях ϵ , величины ϵ , а именно при тех значениях, которые удовлетворяют уравнению

$$n\pi - k_2(a - b) = \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_1} + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3}. \quad (20)$$

Введем следующие обозначения:

$$K = \sqrt{U_1 - U_2}, \quad L = b - a, \quad \cos \gamma = \sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_3 - U_2}} \quad \left(0 < \gamma < \frac{\pi}{2}\right)$$

и новую переменную

$$\xi = \frac{k_2}{K} = \sqrt{\frac{\epsilon - U_2}{U_1 - U_2}}.$$

Уравнение может быть записано в виде условия на ξ :

$$n\pi - \xi KL = \arcsin \xi + \arcsin(\xi \cos \gamma).$$

Последнее уравнение графически решено на рис. 11. Когда ϵ растет от U_2 до U_1 , ξ растет от 0 до 1, а правая часть уравнения растет от 0 до $\pi - \gamma$, следуя кривой C (которая зависит только от параметра γ). В то же время

левая часть уравнения уменьшается от π до $\pi - KL$, следуя отрезку прямой D_n . Чтобы C и D_n пересекались, необходимо и достаточно, чтобы целое число n было достаточно малым:

$$KL \geq (n-1)\pi + \gamma.$$

Если $KL < \gamma$, собственных значений нет; если $\gamma \leq KL \leq \pi + \gamma$, то существует одно собственное значение ϵ_1 ; если $\pi + \gamma \leq KL < 2\pi + \gamma$, имеется два собственных значения ϵ_1 и ϵ_2 ($\epsilon_1 < \epsilon_2$) и т. д. Легко видеть, что собственные значения располагаются в порядке возрастающих n . Они образуют дискретную и конечную последовательность — от основного собственного значения ϵ_1

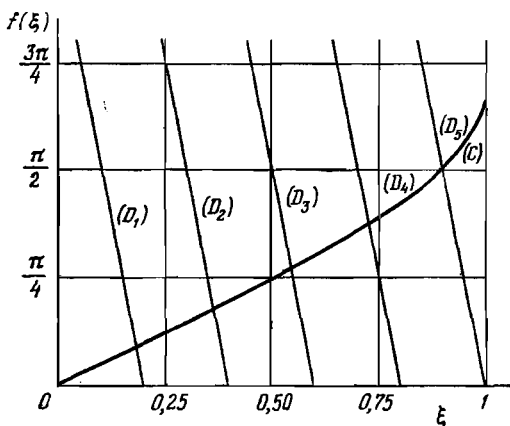


Рис. 11. Графическое решение задачи о дискретных собственных значениях: $\xi = [(\epsilon - U_2)/(U_1 - U_2)]^{1/2}$. Собственные значения суть точки пересечения кривой (C) , заданной уравнением $f(\xi) = [\arcsin \xi + \arcsin(\xi \cos \gamma)]/\pi$, и каждой из прямых (D_n) : $y(\xi) = n - (KL/\pi)\xi$ (принято $\gamma = \pi/3$, $KL/\pi = 5$).

до максимального собственного значения, соответствующего наибольшему целому числу, не превосходящему $1 + (KL - \gamma)/\pi$.

Квантовое число n имеет вполне определенный математический смысл. Рассмотрение уравнений (19) показывает, что функция $\sin(k_2 x + \varphi)$ обращается в нуль $n-1$ раз, когда x пробегает интервал (a, b) . Но, следуя уравнению (17), нули этой функции совпадают с нулями ψ . Следовательно, число узлов собственной функции, соответствующей n -ому собственному значению ϵ_n , есть $n-1$.

В заключение можно провести сравнение с классической ситуацией, как это было сделано в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы. Теперь помимо квантования энергии следует отметить дополнительное отличие; поскольку волновая функция сохраняет отличные от нуля значения в областях I и III, существует отличная от нуля вероятность найти частицу и в этих областях, куда доступ классической частице полностью запрещен.

б) $U_1 < \epsilon < U_3$. Спектр непрерывный невырожденный. Отражение волны.

Мы находимся в ситуации, аналогичной случаю а) в задаче о скачке потенциала. Каждому значению ϵ соответствует

одно и только одно всюду ограниченное решение, именно то, которое экспоненциально затухает в области III: в интервале (U_1, U_3) спектр собственных значений непрерывный и невырожденный.

Мы ищем решение в виде

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + e^{i(k_1x+2\varphi_1)} & x > a, \\ 2Ae^{i\varphi_1} \sin(k_2x + \varphi_2) & a > x > b, \\ 2Be^{i\varphi_1} e^{\kappa_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (21)$$

Как и в предшествующих задачах, условия непрерывности логарифмической производной определяют фазы φ_1 и φ_2 . Находим

$$\varphi_2 = -k_2b + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3},$$

$$\varphi_1 = -k_1a - \frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \left[\frac{k_1}{k_2} \operatorname{tg} \left(k_2L + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\kappa_3} \right) \right],$$

в то же время непрерывность самой функции позволяет определить A и B .

Далее мы будем предполагать, что $U_3 - \epsilon \gg \epsilon - U_2$ откуда $k_2 \ll \kappa_3$ и, следовательно, $k_1 \ll \kappa_3$. Все происходит так, как если бы область III характеризовалась бесконечно отталкивающим потенциалом, так что $B = 0$. Интересующими нас величинами являются φ_1 и A^2 .

Условимся, что $a = 0$, $b = -L$, и положим

$$\eta = \frac{k_1}{K} = \sqrt{\xi^2 - 1}.$$

Тогда после элементарного расчета

$$\varphi_1 = \operatorname{arctg} \left(\frac{\eta}{\xi} \operatorname{tg} \xi KL \right) - \frac{\pi}{2},$$

$$A^2 = \frac{\eta^2}{\eta^2 + \cos^2 \xi KL}.$$

При возрастании энергии фаза φ_1 более или менее регулярным образом растет, в то время как величина A^2 , измеряющая относительную интенсивность волны в области II, осциллирует между значениями $\eta^2/(1+\eta^2)$ и 1. Осцилляции тем более значительны, чем больше KL и чем меньше η . Поэтому предположим в дальнейшем, что

$$KL \gg \pi, \quad \eta \ll 1.$$

В этом случае A^2 как функция η^2 (т. е. энергии) обнаруживает серию острых максимумов ширины $4\eta/KL$, отстоящих друг от друга на $2\pi/KL$. На рис. 12 показано это замечательное поведение A^2 , а также φ_1 в условиях нашего приближения.

Мы сталкиваемся с явлением типично волнового характера, с явлением *резонанса*. Для некоторых ограниченных областей изменения энергии (ширины $4\eta/KL$) интенсивность волны во внутренней области порядка 1: эти резонансные энергии соответствуют условию $\varphi_2 = (n + 1/2)\pi$, т. е. область II содержит

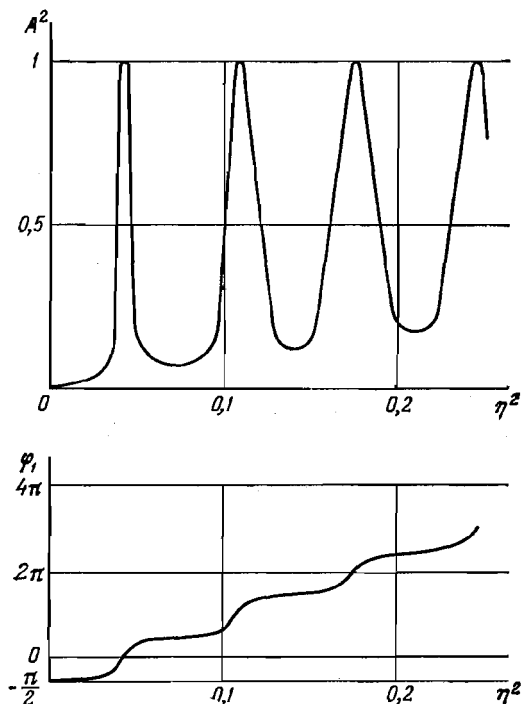


Рис. 12. Резонансы отражений. Изменение A^2 и φ_1 (см. уравнение (21)) в зависимости от энергии. Кривые соответствуют $KL = (b - a)\sqrt{U_1 - U_2} = 100$. По оси абсцисс отложена переменная $\eta^2 = (e - U_1)/(U_1 - U_2)$

$n + 1/2$ «полувольт». Вне этих резонансных областей интенсивность очень мала.

Как и в случае задачи со скачком потенциала, мы можем сравнить движение волнового пакета типа (9) с движением классической частицы в том же потенциале. Приходя из $+\infty$ с постоянной скоростью $v_1 = (\hbar K/m)\eta$, классическая частица испытывает резкое ускорение при $x = 0$, пробегает область II со скоростью $v_2 = (\hbar K/m)\sqrt{1 + \eta^2}$, отражается в точке $x = -L$, движется в противоположном направлении со скоростью v_2 в области II, затем со скоростью v_1 в области I. Время, кото-

рое классическая частица проводит в области II, равно $\tau_{кл} = 2L/v_2$. Центр волнового пакета движется аналогичным образом, по крайней мере в области очень больших x , где пакет не слишком сильно деформирован, так что понятие его центра сохраняет смысл. Все происходит так, как если бы он осуществил то же самое движение за исключением того, что «время, проведенное в области II» равно не $\tau_{кл}$, а $\tau = (2/v_1) d\varphi/dk_1 = (2/v_1 K) d\varphi_1/d\eta$. Мы не будем вдаваться в детали этого исследования, вполне аналогичного проведенному на стр. 89. Поведение различных величин, упоминавшихся выше, сведено в следующую таблицу:

Начальная энергия	φ_1	$\frac{d\varphi_1}{dk_1}$	$\frac{\tau}{\tau_{кл}}$	A^2
В резонансе	$n\pi$	L	$\frac{1}{\eta}$	1
Посередине между двумя резонансами	$(n + \frac{1}{2})\pi$	$L\eta^2$	η	η^2

Между резонансами A^2 остается очень малой величиной, время прохождения области II τ мало по сравнению с $\tau_{кл}$: волновой пакет практически не проникает в область II, волна почти полностью отражается от точки $x=0$. Эта ситуация аналогична оптической, где резкое и значительное изменение показателя почти всегда вызывает полное отражение. Наоборот, в резонансе $A^2=1$, волна полностью проникает в область II и остается там относительно долгий промежуток времени, значительно больший $\tau_{кл}$. Согласно условию (12) полученная картина справедлива только для достаточно пространственно протяженных пакетов, больших чем размеры области II ($(d\varphi_1/dk_1)=L$ в резонансе), и, следовательно, передний фронт волнового пакета достигает точки отражения $x=-L$ значительно раньше того, как волна завершит прохождение точки скачка потенциала $x=0$. Этот эффект имеет чисто волновую природу — происходит интерференция между падающей и отраженной волнами в области II.

в) $\epsilon > U_3$. Спектр непрерывный и вырожденный. Отражение и прохождение волн.

Эта ситуация аналогична случаю б) в задаче со скачком потенциала. Всякому значению ϵ соответствуют две линейно независимые собственные функции: в интервале (U_3, ∞) спектр собственных значений непрерывен и все собственные значения дважды вырождены.

Как и в задаче со скачком потенциала построим собственную функцию в виде

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1 x} + R e^{ik_1 x} & x > a, \\ P e^{-ik_2 x} + Q e^{ik_2 x} & a > x > b, \\ S e^{-ik_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (22)$$

Условия непрерывности в точках a и b позволяют определить R , Q , P и S . Не входя в детали вычислений, приведем результаты для величин R и S . Используем следующие обозначения:

$$a=0 \quad b=-L, \quad K = \sqrt{U_1 - U_2}, \\ \xi = \frac{k_2}{K}, \quad \eta = \frac{k_1}{K}, \quad \zeta = \frac{k_3}{K}.$$

Получаем

$$R = \frac{\xi(\eta - \zeta) \cos \xi KL + i(\xi^2 - \eta\zeta) \sin \xi KL}{\xi(\eta + \zeta) \cos \xi KL - i(\xi^2 + \eta\zeta) \sin \xi KL}, \\ S = e^{-i\zeta KL} \frac{2\eta\xi}{\xi(\eta + \zeta) \cos \xi KL - i(\xi^2 + \eta\zeta) \sin \xi KL}.$$

Эти выражения позволяют сравнить движение волнового пакета, образованного из волн типа (22) с близкими энергиями, с движением классической частицы той же энергии в том же потенциале.

Начальный волновой пакет (образованный в области I из волн $e^{-ik_1 x}$) перемещается в области I с постоянной скоростью $v_1 = \hbar k_1/m$ и встречается с областью II ; после столкновения он разделяется на пакет отраженных волн (образованный волнами $R e^{ik_1 x}$ в области I), перемещающийся со скоростью v_1 к $+\infty$, и пакет проходящих волн (образованный волнами $S e^{-ik_3 x}$ в области III), перемещающийся со скоростью v_3 к $-\infty$. Таким образом, в отличие от классической частицы волновой пакет всегда только частично проходит в область III , и можно определить коэффициент прохождения

$$T = \frac{k_3}{k_1} |S|^2 = \frac{4\eta\xi\xi^2}{\xi^2(\eta + \zeta)^2 \cos^2 \xi KL + (\xi^2 + \eta\zeta)^2 \sin^2 \xi KL}, \quad (23)$$

как мы это уже делали в случае скачка потенциала.

Здесь мы тоже замечаем, что при равной энергии коэффициент прохождения не зависит от направления движения (η и ξ входят симметрично в выражение для T). Можно проверить и равенство

$$|R|^2 + \frac{k_3}{k_1} |S|^2 = 1. \quad (24)$$

Относительная величина отраженной и проходящей волн изменяется с энергией и можно обнаружить существование явлений резонанса того же типа, что и в случае б). Они особенно заметны когда $KL \gg \pi$, $\xi < \eta \ll 1$ (т. е. $\xi = 1$). В этом случае видно при исследовании уравнения (23), что коэффициент прохождения, рассматриваемый как функция η^2 (т. е. как функция энергии), остается очень малым (порядка $4\eta\xi$) почти всюду, но обнаруживает серию резких максимумов, равных $4\pi\xi/(\eta + \zeta)^2$. Ширина этих максимумов равна примерно $4(\eta + \zeta)/KL$. Положения максимумов соответствуют энергиям, для которых в области II укладывается целое число n «полувольт», а именно $\xi KL = n\pi$ (расстояние между максимумами около $2\pi/KL$).

Можно продолжить это исследование, рассматривая фазы амплитуд R и S , определить «время прохождения» проходящей волны или «время отражения» отраженной волны и сравнить эти величины со временем пересечения области II классической частицей. Качественно получается следующая картина: в резонансе волна остается концентрированной в области II в течение промежутка времени, значительно (в $(\eta + \zeta)^{-1}$ раз) превосходящего классическое время, прежде чем разделиться на проходящую и отраженную волны; вне резонанса волна практически не проникает в область II , она почти полностью отражается на границе областей I и II причем почти мгновенно (см. задачу 1).

§ 7. Прохождение прямоугольного потенциального барьера. Туннельный эффект

В качестве последнего примера рассмотрим прохождение прямоугольного потенциального барьера (рис. 13)

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x > L & (\text{область } I), \\ U_0 (> 0) & 0 < x < L & (\text{область } II), \\ 0 & x < 0 & (\text{область } III). \end{cases}$$

В этом случае все положительные значения ε являются собственными значениями, двукратно вырожденными. Следует рассмотреть две возможности: ε может быть больше или меньше U_0 . В обоих случаях образуем решение, представляющее в области III волну, распространяющуюся в отрицательном направлении, т. е. решение вида $e^{-i\sqrt{\varepsilon}x} + R e^{i\sqrt{\varepsilon}x}$ для $x > L$ и $S e^{-i\sqrt{\varepsilon}x}$ для $x < 0$.

Ее поведение в области II : экспоненциальное: $A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$, если $\varepsilon < U_0$ ($\kappa = \sqrt{U_0 - \varepsilon}$);

синусоидальное: $C e^{ikx} + D e^{-ikx}$, если $\varepsilon > U_0$

$$(k = \sqrt{\varepsilon - U_0}).$$

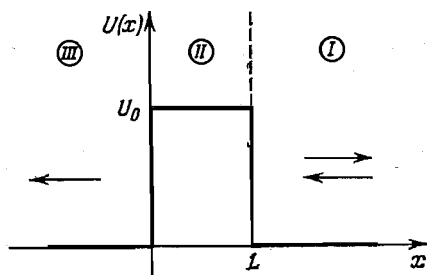


Рис. 13. Прямоугольный барьер

Ограничимся тем, что дадим результат вычисления коэффициента прохождения (рис. 14):

$$T = |S|^2 = \begin{cases} \frac{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)}{4\varepsilon(\varepsilon - U_0) + U_0^2 \sin^2 kL}, & \text{если } \varepsilon > U_0; \\ \frac{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon) + U_0^2 \operatorname{sh}^2 \kappa L}, & \text{если } \varepsilon < U_0. \end{cases}$$

Как и в предшествующих параграфах, можно сравнить движение волнового пакета типа (9), образованного из написанных

выше волн, с движением классической частицы, приходящей из $+\infty$.

Наиболее показательное различие имеет место при $\varepsilon < U_0$. Классическая частица отражается от барьера, не имея возможности его преодолеть. Волновой пакет разделяется на отраженный пакет и пакет проходящий, причем интенсивность последнего никогда не обращается в нуль. При возрастании ε от

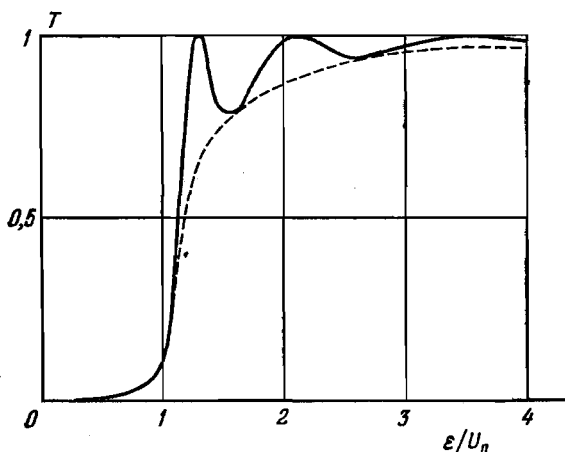


Рис. 14. Изменение коэффициента прохождения в зависимости от энергии для потенциального барьера, показанного на рис. 13. Принято $U_0 L^2 = 40$.

нуля до U_0 коэффициент прохождения монотонно растет от нуля до значения $(1 + U_0 L^2/4)^{-1}$. Явление прохождения частиц потенциального барьера называется *туннельным эффектом* и играет важную роль в теории радиоактивного α -распада. Величина туннельного эффекта тем больше, чем меньше высота барьера и его ширина.

Когда $\varepsilon > U_0$, классическая частица замедляется в области II, но тем не менее пересекает ее и продолжает свой путь в области III в направлении $-\infty$. Волновой пакет всегда, хотя бы частично, отражается. Полное прохождение ($T = 1$) имеет место только при некоторых значениях энергии, когда kL равно целому числу π . При росте энергии коэффициент прохождения колеблется между этим максимальным значением и минимальным, равным $4\varepsilon(\varepsilon - U_0)/(2\varepsilon - U_0)^2$. Эффект особенно заметен, когда барьер очень высок или очень широк и когда кинетическая энергия $\varepsilon - U_0$ в области II мала. Можно отметить сходство с резонансными явлениями, обсуждавшимися в предшествующих параграфах (см. задачу 2).

Раздел II. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

§ 8. Свойства вронскиана

Вернемся к уравнению

$$y'' + [\varepsilon - U(x)] y = 0. \quad (25)$$

Выведем несколько общих свойств этого уравнения на собственных значениях. В дальнейшем будем требовать ограниченности вещественной функции $U(x)$, допуская только конечное число разрывов первого рода на всем интервале $(-\infty, +\infty)$.

Большое число интересующих нас свойств этого уравнения непосредственно вытекает из важной теоремы, касающейся определителя Вронского, составленного из двух решений уравнения; эту теорему мы будем в дальнейшем называть *теоремой вронскиана*.

Определителем Вронского, или вронскианом двух функций y_1 и y_2 называется выражение

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_2 y_1'.$$

Это выражение антисимметрично по отношению к перестановке функций y_1 и y_2 . Если вронскиан равен нулю в некоторой точке на оси x , функции y_1 и y_2 имеют в этой точке равные логарифмические производные; если вронскиан равен нулю на всем интервале $(-\infty, +\infty)$, функции пропорциональны друг другу.

Теорема вронскиана. Если z_1 и z_2 являются соответственно решениями уравнений

$$z_1'' + F_1(x) z_1 = 0, \quad (25')$$

$$z_2'' + F_2(x) z_2 = 0 \quad (25'')$$

в интервале (a, b) , где функции $F_1(x)$ и $F_2(x)$ непрерывны или имеют разрывы только первого рода, то изменение вронскиана на этом интервале дается выражением

$$W(z_1, z_2) \Big|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)] z_1 z_2 dx. \quad (26)$$

Чтобы доказать эту теорему, умножим уравнение $(25')$ на z_2 , а уравнение $(25'')$ — на z_1 и вычтем полученные выражения одно из другого. Получаем

$$(z_2 z_1'' - z_1 z_2'') + (F_1 - F_2) z_1 z_2 = 0.$$

Первый член в круглых скобках есть (с точностью до знака) производная вронскиана по x . Интегрируя равенство по x в интервале (a, b) , получаем соотношение (26) .

Эта теорема оказывается особенно полезной, когда уравнения (25') или (25'') являются уравнениями типа (5) с одним и тем же потенциалом $U(x)$ и с заданными значениями энергии ϵ . В этом случае получаем три важных следствия:

Следствие 1. Если y_1 и y_2 являются решениями уравнения (5), соответствующими значениям ϵ_1 и ϵ_2 постоянной ϵ , то для всяких двух значений a и b переменной x из области определения решений имеем

$$W(y_1, y_2)|_a^b = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b y_1 y_2 dx. \quad (27)$$

Следствие 2. Если y и z являются двумя решениями уравнения (5), соответствующими одному значению ϵ , их вронскиан не зависит от x

$$W(y, z) = \text{const.}$$

Следствие 3. Пусть $Y(x; \epsilon)$ есть решение уравнения (5), логарифмическая производная которого (по переменной x) имеет определенное значение f_a в точке $x = a$, и пусть $f(x; \epsilon)$ есть логарифмическая производная этого решения в произвольной точке x . Рассматриваемая как функция ϵ , величина $f(x; \epsilon)$ является монотонной функцией этой переменной, растущей при $x < a$ и убывающей при $x > a$, причем производная равна

$$\frac{\partial f}{\partial \epsilon} = - \frac{1}{Y^2(x; \epsilon)} \int_a^x Y^2(\xi; \epsilon) d\xi \quad (28)$$

(как функция ϵ , величина $f(x; \epsilon)$ ведет себя подобно тангенсу или котангенсу при наличии вертикальной асимптоты в каждой точке, где $Y(x)$ обращается в нуль).

Следствия 1 и 2 непосредственно вытекают из теоремы вронскиана. Доказательство следствия 3 таково. Если ϵ фиксировано, то решение уравнения (5) полностью определяется при задании значения решения и его производной в некоторой точке $x = a$ на оси x . Пусть $Y(x; \epsilon)$ есть это частное решение:

$$Y(a; \epsilon) = y_a, \quad Y'(a; \epsilon) = y'_a.$$

Если теперь изменять ϵ , сохраняя неизменными указанные условия, то $Y(x; \epsilon)$ будет некоторой непрерывной функцией ϵ (и x). Двум бесконечно близким значениям ϵ , $\epsilon + \delta\epsilon$ соответствуют два бесконечно близких выражения Y , $Y + \delta Y$. Применим к ним следствие 1 на интервале (a, b) :

$$W(Y, Y + \delta Y)|_a^b = - \delta\epsilon \int_a^b Y^2 dx.$$

При $x = a$ согласно предположению $W(Y, Y + \delta Y) = 0$. Для всякого другого значения x

$$W(Y, Y + \delta Y) = Y\delta Y' - Y'\delta Y = Y^2\delta\left(\frac{Y'}{Y}\right) = Y^2\delta f.$$

Здесь мы положили $f = Y'/Y$. Логарифмическая производная f , подобно Y , является непрерывной функцией ε и x . Поэтому

$$-Y^2\delta f|_{x=b} = \delta\varepsilon \int_a^b Y^2 dx$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \Big|_{x=b} = -\frac{1}{Y^2(b)} \int_a^b Y^2(x) dx,$$

что и требовалось доказать.

Свойства решений уравнения Шредингера, вытекающие из указанных трех следствий теоремы вронскиана, имеют большое значение, так как эти свойства не зависят от конкретной формы потенциала $U(x)$.

§ 9. Асимптотическое поведение решений

Асимптотическая форма общего решения уравнения (5) на краях интервала $(-\infty, +\infty)$ существенно зависит от знака разности $\varepsilon - U$ при x , стремящемся к одному из пределов $\pm\infty$. Рассмотрим асимптотическую форму решения при $x \rightarrow +\infty$. Аналогичные результаты получаются и при $x \rightarrow -\infty$. Допустим, что $\varepsilon - U(x)$ не меняет знака, когда x превосходит некоторое значение x_0 . При этом возможны два случая.

1) $\varepsilon > U(x)$, когда $x > x_0$. Предположим (так обычно бывает на практике), что при $x \rightarrow \infty$ функция $U(x)$ монотонно стремится к конечному пределу U_+ . Положим $k = \sqrt{\varepsilon - U_+}$.

Мы покажем, что при $x \rightarrow \infty$:

— вещественные решения уравнения (5) остаются ограниченными и бесконечно осциллируют между двумя противоположными значениями;

— если, кроме того, $U(x)$ стремится к U_+ быстрее, чем $1/x$, то

$$y \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} A_+ \sin(kx + \varphi_+), \quad (29)$$

где A_+ и φ_+ суть две вещественные постоянные.

Для доказательства заметим, что уравнение (5) «асимптотически стремится» к уравнению $z'' + k^2 z = 0$, общее решение которого есть $A \sin(kx + \varphi)$, т. е. зависит от двух произвольных постоянных A и φ . Чтобы найти

асимптотическую форму y , введем (метод вариации постоянных) функции $A(x)$ и $\varphi(x)$, определенные равенствами

$$y = A \sin(kx + \varphi), \quad y' = Ak \cos(kx + \varphi). \quad (30)$$

Уравнение (5) эквивалентно двум дифференциальным уравнениям первого порядка:

$$\frac{A'}{A} = \frac{U - U_+}{2k} \sin 2(kx + \varphi), \quad \varphi' = -\frac{U - U_+}{k} \sin^2(kx + \varphi).$$

Отсюда интегрированием получаем

$$A(x) = A(x_0) \exp \left\{ \int_{x_0}^x \frac{U(\xi) - U_+}{2k} \sin 2[k\xi + \varphi(\xi)] d\xi \right\}, \quad (31)$$

$$\varphi(x) = \varphi(x_0) - \int_{x_0}^x \frac{U(\xi) - U_+}{k} \sin^2[k\xi + \varphi(\xi)] d\xi. \quad (32)$$

Интеграл в правой части (31) сходится, поэтому при $x \rightarrow \infty$ функция $A(x)$ стремится к конечному пределу A_+ . Далее, поскольку $\varphi' \rightarrow 0$, функция $\sin(kx + \varphi)$ в выражении (30) осциллирует с периодом, который асимптотически стремится к $2\pi/k$. Это доказывает первый из формулированных выше результатов. Если, кроме того, $U(x)$ стремится к U_+ быстрее, чем $1/x$, то сходится и интеграл в правой части уравнения (32); в этом случае обе функции A и φ стремятся к конечным пределам A_+ и φ_+ , соответственно, что доказывает справедливость асимптотической формы (29).

2) $\varepsilon < U(x)$, когда $x > x_0$. Результаты, которые мы получим, не зависят от поведения $U(x)$ на бесконечности. Предположим только, что

$$U(x) - \varepsilon \geq M^2 > 0 \quad \text{при} \quad x > x_0.$$

Этот случай соответствует экспоненциальным решениям в задачах с прямоугольным потенциалом.

Мы покажем, что при $x \rightarrow \infty$:

— существует одно частное решение (определенное с точностью до постоянного множителя) уравнения (5), стремящееся к 0 не медленнее, чем e^{-Mx} ;

— все другие решения стремятся к ∞ не медленнее, чем e^{Mx} .

Поскольку решения определены с точностью до постоянной, фиксируем эту постоянную условием $y(x_0) = 1$ и рассмотрим поведение решений, удовлетворяющих этому условию нормировки. Некоторые из таких решений представлены на рис. 15.

Обозначим через $Y(x)$ и $Z(x)$ частные решения, определенные условиями

$$Y(x_0) = 1, \quad Y'(x_0) = 0 \quad \text{и} \quad Z(x_0) = 0, \quad Z'(x_0) = 1;$$

тогда искомые решения можно записать в виде

$$y(x) = Y(x) + fZ(x). \quad (33)$$

Параметр $f = y'(x_0)$ может принимать все значения между $-\infty$ и $+\infty$.

Решения $Y(x)$ и $Z(x)$ остаются положительными во всем интервале (x_0, ∞) и стремятся к бесконечности не медленнее, чем e^{Mx} . Действительно, как всякое решение уравнения (5), эти функции всюду имеют тот же знак, что и их вторые производные. Отсюда следует, если учесть начальные условия, что они могут только бесконечно расти, причем график все время остается выпуклым вниз. Чтобы оценить скорость возрастания, заметим, что $Y'' \geq M^2 Y$ и $Z'' \geq M^2 Z$ и сравним эти функции с решениями дифференциального уравнения $u'' - M^2 u = 0$, удовлетворяющим тем же начальным условиям в точке x_0 , а именно $\operatorname{ch} M(x - x_0)$ и $\operatorname{sh} M(x - x_0)$, соответственно; Y и Z всюду больше этих решений (или равны им).

Применяя теорему вронскиана, имеем

$$W(Y, \operatorname{ch} M(x - x_0)) \leq 0,$$

поэтому

$$\frac{Y'}{Y} \geq M \operatorname{th} M(x - x_0).$$

Интегрируя, получаем

$$Y \geq \operatorname{ch} M(x - x_0).$$

Аналогично доказываем, что $Z \geq \operatorname{sh} M(x - x_0)$. Заметим попутно, что

$$Y' \geq MY \operatorname{th} M(x - x_0),$$

поэтому на бесконечности $Y' \geq MY$; аналогично на бесконечности $Z' \geq MZ$. С другой стороны (следствие 2)

$$Z'Y - Y'Z = 1 \quad \text{при любом } x. \quad (34)$$

Введем функции

$$u(x) \equiv \frac{Y}{Z}, \quad v(x) \equiv \frac{Y'}{Z'}.$$

Из равенства (34) и того факта, что Y и Z являются решениями уравнения (5), следует:

$$\left. \begin{aligned} u - v &\equiv \frac{Y}{Z} - \frac{Y'}{Z'} = \frac{1}{ZZ'}, \\ u' &= \frac{Y'Z - YZ'}{Z^2} = -\frac{1}{Z^2}, \\ v' &= \frac{Y''Z' - Y'Z''}{Z'^2} = \frac{U - \varepsilon}{Z'^2}. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

В интервале (x_0, ∞) u есть убывающая функция, а v — функция возрастающая, причем их разность на бесконечности обращается в нуль. Поэтому они имеют общий (положительный) предел C при $x \rightarrow \infty$ и

$$v(x) < C < u(x).$$

Учитывая (35), это неравенство можно переписать в виде

$$-\frac{1}{ZZ'} < v - C < 0 < u - C < \frac{1}{ZZ'}. \quad (36)$$

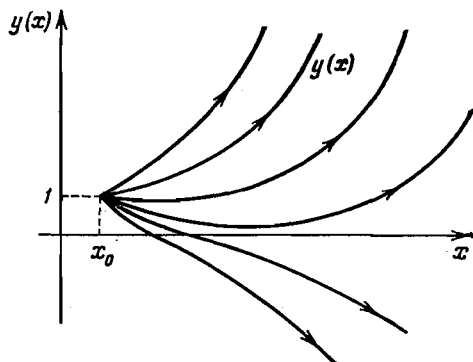


Рис. 15. Диаграмма, представляющая некоторые решения уравнения (5), удовлетворяющие условию $y(x_0) = 1$ в случае, когда $U(x) - \varepsilon \geq M^2 > 0$ для $x > x_0$.

Частное решение

$$\hat{y}(x) = Y - CZ = [u(x) - C] Z(x)$$

и его производная

$$\hat{y}'(x) = Y' - CZ' = [v(x) - C] Z'(x)$$

удовлетворяют всюду неравенствам

$$-\frac{1}{Z} < \hat{y}' < 0 < \hat{y} < \frac{1}{Z'}.$$

Всюду положительная функция $\hat{y}$ стремится к нулю не медленнее, чем $1/Z'$ и, следовательно, не медленнее, чем e^{-mx} . Всяду отрицательная функция $\hat{y}'$ стремится к нулю не медленнее, чем e^{-mx} . Решение $\hat{y}$ есть решение, обращающееся в нуль на бесконечности, которое мы ищем.

Не существует других решений, обладающих этим свойством, так как если $\hat{f} \neq -C$, то решение $y(x)$ может быть записано в виде

$$y = \hat{y} + (\hat{f} + C) Z,$$

и его асимптотическое поведение совпадает с поведением функции Z с точностью до отличного от нуля множителя $\hat{f} + C$.

§ 10. Структура спектра собственных значений

Пусть U_+ и U_- являются предельными значениями $U(x)$ при $x \rightarrow +\infty$ и $x \rightarrow -\infty$ соответственно. Дальнейшие выводы остаются справедливыми, если одно и (или) другое предельные значения оказываются равными $+\infty$. Величины U_+ и U_- делят область изменения ε на три области, в которых спектр собственных значений имеет различную природу. Положим, для определенности, что $U_+ < U_-$.

В области $\varepsilon > U_-$ разность $\varepsilon - U(x)$ остается положительной на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$. Всякое решение уравнения (5), ограниченное при $x \rightarrow \pm\infty$, допустимо в качестве собственной функции, поэтому ε есть двукратно вырожденное собственное значение. Спектр собственных значений *непрерывный* и *вырожденный*. С другой стороны, в обеих асимптотических областях собственные функции бесконечно осциллируют между двумя противоположными конечными предельными значениями: они представляют *несвязанные состояния*.

В области $U_- > \varepsilon > U_+$, где разность $\varepsilon - U(x)$ в пределе $x \rightarrow -\infty$ отрицательна, существует только одно ограниченное (экспоненциально убывающее) решение, в отрицательной асимптотической области. Это решение остается ограниченным и бесконечно осциллирует в другой асимптотической области, так как разность $\varepsilon - U(x)$ в этой области положительна. Следовательно, это решение допустимо в качестве собственной функции и представляет несвязанное состояние. Спектр собственных значений *непрерывный невырожденный*.

Когда $U_+ > \varepsilon$, разность $\varepsilon - U(x)$ отрицательна в обеих асимптотических областях. Ограниченное решение, если оно су-

существует, обращается в нуль (экспоненциально) на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$ и представляет *связанное состояние*. Но оно существует только при некоторых определенных дискретных значениях ϵ . Действительно, пусть $\hat{y}_-$ есть решение, обращающееся в нуль при $x \rightarrow -\infty$, а $\hat{y}_+$ — решение, обращающееся в нуль при $x \rightarrow +\infty$, f_- и f_+ соответственно их логарифмические производные в некоторой точке на оси x . Величина ϵ есть собственное значение в том и только в том случае, если $\hat{y}_-$ и $\hat{y}_+$ равны (с точностью до постоянного фактора), т. е. если $f_- = f_+$. Но, рассматриваемые как функции энергии ϵ , f_- есть монотонно убывающая функция, а f_+ — монотонно возрастающая функция (следствие 3)⁴). Они могут быть равны друг другу только при некоторых изолированных значениях ϵ . Спектр *дискретный и невырожденный*.

Число собственных значений дискретного спектра существенно зависит от формы функции $U(x)$. Оно может изменяться от 0 до бесконечности. Число дискретных собственных значений очевидно равно нулю, если функция $U(x)$ всюду превосходит наименьшее (U_+) из двух асимптотических значений. Вообще же можно показать (здесь мы это примем без доказательства), что число дискретных собственных значений оказывается порядка величины

$$\frac{1}{\pi} \int \sqrt{U_+ - U(x)} dx = \frac{1}{\pi} \int \frac{\sqrt{2m(V_+ - V(x))}}{\hbar} dx,$$

где интегрирование распространено на ту область оси x , где $U(x) < U_+$. В частности, если этот интеграл расходится, число собственных значений дискретного спектра бесконечно.

§ 11. Состояния непрерывного спектра: отражение и прохождение волн

Собственные функции непрерывной и двукратно вырожденной части спектра позволяют представить движение частично проходящих и частично отраженных волновых пакетов в поле потенциала $U(x)$. Чтобы избежать трудностей, предположим, что $U(x)$ стремится к своим асимптотическим значениям

⁴) Дело идет о распространении следствия 3 на случай, когда $a = +\infty$ или $a = -\infty$. Нетрудно видеть, что следствие по-прежнему справедливо, если только несколько изменить определение функции $Y(x, \epsilon)$. Эта функция должна быть решением уравнения (5), обращающемся в нуль (вместе со своей производной) в точке a ($= \pm\infty$). Заметим, что f_- и f_+ при некоторых значениях ϵ могут обладать вертикальными асимптотами.

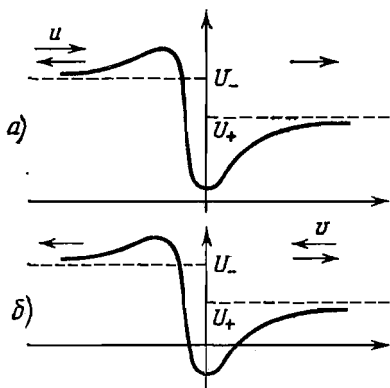
U_+ и U_- быстрее, чем $1/x$, так чтобы можно было использовать асимптотическую форму (29) вещественных собственных функций.

Интересующие нас волновые пакеты могут быть построены с помощью собственных функций двух типов. Функции первого типа $u(x)$ суть функции, поведение которых в двух асимптотических областях выражается соотношениями

$$u \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} e^{ik_-x} + R_u e^{-ik_-x},$$

$$u \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} S_u e^{ik_+x} \quad (k_{\pm} = \sqrt{e - U_{\pm}}).$$

Волновой пакет вида (9) представляет падающую волну e^{ik_-x} , движущуюся из $-\infty$ в положительном направлении, которая



затем попадает в зону действия потенциала $U(x)$ и разделяется на отраженную волну $R_u e^{-ik_-x}$, движущуюся в противоположном направлении и прошедшую волну $S_u e^{ik_+x}$, распространяющуюся в направлении $+\infty$ (рис. 16, а).

Функции второго типа $v(x)$ асимптотически представляются формулами

$$v \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} S_v e^{-ik_-x},$$

$$v \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-ik_+x} + R_v e^{ik_+x},$$

Рис. 16. Отражение и прохождение волны через потенциал: а) решение типа u : волна, приходящая со стороны отрицательных x ; б) решение типа v : волна, приходящая со стороны положительных x .

что позволяет описать аналогичный волновой пакет, распространяющийся в противоположном направлении (рис. 16, б).

Функции u , v и комплексно сопряженные функции u^* , v^* являются решениями одного уравнения Шредингера. Рассмотрим вронскиан, образованный двумя из этих решений, он не зависит от x (следствие 2). Записывая условие его тождественности в двух асимптотических областях, можно получить соотношение между коэффициентами R_u , S_u , R_v , S_v или комплексно сопряженными величинами. Существует столько соотношений этого вида, сколько можно построить различных пар из функций u , v , u^* , v^* , т. е. всего шесть соотношений, не зависящих от конкретной формы потенциала $U(x)$.

Получаем⁵⁾:

$$\frac{i}{2} W(u, u^*) = k_- (1 - |R_u|^2) = k_+ |S_u|^2, \quad (37)$$

$$\frac{i}{2} W(v, v^*) = -k_- |S_v|^2 = -k_+ (1 - |R_v|^2), \quad (38)$$

$$\frac{i}{2} W(u, v) = k_- S_v = k_+ S_u, \quad (39)$$

$$\frac{i}{2} W(u, v^*) = -k_- R_u S_v^* = k_+ S_u R_v^*, \quad (40)$$

а также еще два соотношения, получаемые из двух последних переходом к комплексно сопряженным величинам.

Уравнения (37) и (38) называются соотношениями *сохранения потока*; мы их уже проверили ранее в конкретных случаях (уравнения (13) и (24)). Происхождение названия следует из следующего истолкования волновой функции ψ несвязанного состояния в асимптотической области (обоснованность этого истолкования мы подробно рассмотрим в гл. X при изучении проблем рассеяния). Пусть $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ есть форма волновой функции ψ в одной из асимптотических областей, скажем при $x \rightarrow -\infty$. Если с помощью этой волновой функции образовать волновой пакет вида (9), то он будет состоять из двух членов: один, образованный из Ae^{ikx} , имеет относительную интенсивность $|A|^2$ и распространяется в направлении возрастающих x со скоростью $\hbar k/m$, другой, образованный из Be^{-ikx} , имеет интенсивность $|B|^2$ и распространяется с той же скоростью в противоположном направлении. Полный поток частиц в некоторой точке в направлении возрастающих x есть разность между потоком $(\hbar k/m) |A|^2$ частиц, движущихся в положительном направлении, и потоком $(\hbar k/m) |B|^2$ частиц, движущихся в отрицательном направлении. С точностью до постоянного множителя он равен вронскиану $W(\psi, \psi^*)$:

$$\frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) = \frac{i}{2} \frac{\hbar k}{m} W(\psi, \psi^*).$$

Тот факт, что на концах интервала $(-\infty, +\infty)$ вронскиан имеет одинаковые значения, означает, что число частиц, входящих в зону действия потенциала в единицу времени, равно числу частиц, выходящих из этой зоны в тот же промежуток времени.

Согласно этой интерпретации каждое из уравнений (37) и (38) может быть записано в виде:

падающий поток — отраженный поток = проходящему потоку.

⁵⁾ Вычисление особенно упрощается, если учесть свойство антисимметричности вронскиана и равенства

$$W(e^{ikx}, e^{ikx}) = W(e^{-ikx}, e^{-ikx}) = 0, \quad W(e^{-ikx}, e^{ikx}) = 2ik.$$

Следуя той же интерпретации, можно определить коэффициент прохождения T отношением

$$T \equiv \frac{\text{проходящий поток}}{\text{падающий поток}}.$$

В частности, имеем

$$T_u = \frac{k_+}{k_-} |S_u|^2, \quad T_v = \frac{k_-}{k_+} |S_v|^2.$$

Учитывая равенство модулей обеих частей уравнения (39), получаем равенство

$$T_u = T_v. \quad (41)$$

При заданной энергии коэффициент прохождения волны не зависит от направления распространения. Это — *свойство взаимности* коэффициента прохождения, отмеченное уже на стр. 92 и 100. Можно сказать, что проницаемость барьера в обоих направлениях одинакова.

Равенство модулей обеих частей уравнения (40) вместе с соотношениями сохранения (37) и (38) вновь дает соотношение взаимности (41).

Из уравнений (39) и (40) можно получить также соотношения между фазами комплексных амплитуд отражения и прохождения:

$$\text{фаза } (S_u) = \text{фаза } (S_v),$$

$$\text{фаза } \left(\frac{R_u}{S_u} \right) = \pi - \text{фаза } \left(\frac{R_v}{S_v} \right).$$

Эти соотношения могут представить интерес, если связывать фазы с некоторым «запаздыванием» в распространении волновых пакетов. Мы несколько раз отмечали, что величина $\hbar \partial (\text{фаза}) / \partial E$, т. е. умноженная на $\hbar$ производная фазы комплексных амплитуд отражения или прохождения по энергии (величина с размерностью времени), может быть интерпретирована как «запаздывание» волны в явлениях отражения и прохождения. Это истолкование распространяется и на общий случай.

§ 12. Число узлов связанных состояний

Рассмотрим теперь собственные функции (если они существуют) дискретного спектра. В этом случае нет вырождения; следовательно, эти функции наверняка действительны с точностью до постоянного фазового множителя.

Вернемся к обозначениям на стр. 103. Предположим, что функции y_1 и y_2 действительны, $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ и применим соотношение (27), взяв в качестве пределов интегрирования два последовательных нуля функции y_1 . Получаем

$$y_2 y_1' \Big|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 y_2 dx.$$

В интервале (a, b) функция y_1 сохраняет свой знак. Предположим, например, что $y_1 > 0$. В этом случае $y_1'(a) > 0$, $y_1'(b) < 0$. Следовательно, функция y_2 в интервале (a, b) наверняка меняет знак. Если бы это было не так, то правая часть уравнения имела бы знак y_2 , а левая часть — противоположный знак. Поэтому y_2 обязательно имеет по крайней мере один нуль внутри интервала (a, b) . Между двумя узлами y_1 всегда имеется по крайней мере один узел y_2 .

Предположим, что y_1 и y_2 являются собственными функциями дискретного спектра. Обе они обращаются в нуль («экспоненциально») на границах интервала $(-\infty, +\infty)$. Узлы y_1 (пусть число их равно n_1) делят весь интервал на $n_1 + 1$ чистичных интервалов. К каждому из них можно применить только что доказанное свойство: функция y_2 имеет по крайней мере $n_1 + 1$ узел. Таким образом, собственная функция имеет тем больше узлов, чем выше собственное значение, которому она соответствует.

Повторяя рассуждения на стр. 109, касающиеся построения собственных функций, и учитывая увеличение числа узлов функций y_- и y_+ по мере увеличения энергии ϵ , можно получить следующее более точное утверждение (задачи 4 и 5).

Если расположить собственные состояния по порядку возрастания энергии $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n, \dots$, то собственные функции называются расположенными по возрастающему числу узлов. При этом n -ая собственная функция имеет $n - 1$ узел и между каждыми двумя узлами n -ой функции имеется по крайней мере один узел следующих по номеру собственных функций.

§ 13. Соотношения ортогональности

Другое важнейшее следствие теоремы вронскиана можно получить, если в уравнении (27) устремить пределы интегрирования a и b к $-\infty$ и $+\infty$ соответственно.

Пусть y_1 и y_2 суть две собственные функции, принадлежащие двум собственным значениям дискретного спектра. Обе они обращаются в нуль на бесконечности, вронскиан, составленный из них, — тоже и поскольку $\epsilon_2 - \epsilon_1 \neq 0$, имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1 y_2 dx = 0. \quad (42)$$

Если интеграл от произведения $y_1 y_2$ двух действительных функций, распространенный на все пространство, равен нулю, говорят, что эти две функции ортогональны. В более общем случае две комплексные функции действительного переменного y_1 и y_2

ортогональны, если

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1^* y_2 dx = 0.$$

Таким образом, собственные функции дискретного спектра ортогональны. Ясно, что этот результат справедлив и в том случае, когда только одна из двух функций принадлежит дискретному спектру.

Переход к пределу в уравнении (27) оказывается более деликатным, когда обе функции y_1 и y_2 принадлежат непрерывному спектру. В этом случае вронскиан $W(y_1, y_2)$ бесконечно осциллирует по крайней мере на одном из пределов интегрирования, интеграл $\int y_1 y_2 dx$, следовательно, обладает тем же свойством. Однако если заменить в интеграле хотя бы одну собственную функцию, например y_2 , волновым пакетом, образованным из собственных функций, соответствующих малой области энергий $\delta\epsilon$ в окрестности энергии ϵ_2 , то соотношение ортогональности оказывается справедливым при условии $\delta\epsilon \ll |\epsilon_1 - \epsilon_2|$. Действительно, запишем y_2 в форме $y(x; \epsilon)$, чтобы подчеркнуть, что это функция с энергией ϵ ⁶⁾. Образует волновой пакет

$$Y_2(x; \delta\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{\delta\epsilon}} \int_{\epsilon_2}^{\epsilon_2 + \delta\epsilon} y(x; \epsilon) d\epsilon. \quad (43)$$

Поскольку вронскиан $W(y_1, y_2)$ линейно зависит от функции y_2 , получаем, интегрируя обе части уравнения (27);

$$W(Y_2, y_1) \Big|_a^b =$$

$$= (\epsilon_2 - \epsilon_1) \int_a^b y_1 Y_2 dx + \int_a^b y_1 \left[\frac{1}{\sqrt{\delta\epsilon}} \int_{\epsilon_2}^{\epsilon_2 + \delta\epsilon} (\epsilon - \epsilon_2) y(x; \epsilon) d\epsilon \right] dx.$$

Смысл этого преобразования состоит в том, что Y_2 стремится к нулю (как $1/x$) в тех асимптотических областях, где y_2 обнаруживает поведение осцилляторного типа. Поэтому, когда a и b стремятся, соответственно, к $-\infty$ и $+\infty$, левая часть уравнения стремится к нулю, так что сумма двух сходящихся интегралов в правой части равна нулю. Но в предельном случае

⁶⁾ Задания ϵ не достаточно для определения решения $y(x; \epsilon)$, оно зависит от одной или двух произвольных постоянных, в зависимости от кратности вырождения собственного значения. Произвол устраняется заданием асимптотической формы $y(x; \epsilon)$ на одном из пределов ($-\infty$ или $+\infty$) интервала интегрирования.

$\delta\epsilon \ll |\epsilon_2 - \epsilon_1|$ второй из этих интегралов пренебрежимо мал. Можно поэтому написать

$$\lim_{\delta\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} y_1(x) Y_2(x; \delta\epsilon) dx = 0. \quad (42')$$

Волновой пакет $Y_2(x; \delta\epsilon)$, определенный уравнением (43), в котором $\delta\epsilon$ есть очень малая величина, называется «собственным дифференциалом» функции $y_2(x)$. Подразумевается, что в конце вычислений осуществляется переход к пределу $\delta\epsilon \rightarrow 0$.

В заключение делаем вывод, что *две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны* при условии, что когда обе собственные функции принадлежат непрерывному спектру, по крайней мере одна из них в соотношении ортогональности (уравнение (42')) должна быть заменена ее собственным дифференциалом.

Наше определение собственного дифференциала очень схематично. На практике это понятие никогда не используется. Мы увидим в дальнейшем, что существуют элегантные математические методы, позволяющие придать свойству ортогональности самый общий характер, не прибегая к понятию собственного дифференциала.

§ 14. Замечание по поводу четности

Возвратимся к понятию четности, которое нам встретилось первый раз при рассмотрении примера с бесконечно глубокой потенциальной ямой. Это свойство имеет самый общий характер.

Если потенциал $U(x)$ четный, т. е. если

$$U(x) = U(-x),$$

то гамильтониан уравнения Шредингера также инвариантен относительно замены x на $-x$: он *симметричен относительно начала координат*. Поэтому если $\psi(x)$ есть собственная функция, принадлежащая собственному значению E ,

$$H\psi(x) = E\psi(x),$$

то уравнение не меняется при замене x на $-x$, т. е.

$$H\psi(-x) = E\psi(-x).$$

Следовательно, $\psi(x)$ и $\psi(-x)$, а также четная функция $\psi(x) + \psi(-x)$ и нечетная функция $\psi(x) - \psi(-x)$ — все являются собственными функциями одного собственного значения E . По крайней мере одна из двух последних функций не равна тождественно нулю. Возможны два случая:

1. *Собственное значение E не вырождено.* Четыре упомянутые функции равны друг другу с точностью до постоянных множителей. Функция $\psi(x)$ пропорциональна той из функций $\psi(x) + \psi(-x)$ и $\psi(x) - \psi(-x)$, которая не равна тождественно нулю (другая необходимо есть тождественный нуль). Таким образом, собственные функции невырожденной части спектра имеют определенную четность: одни четные, другие нечетные. Кроме того, четная функция обязательно имеет четное число узлов, а нечетная функция — нечетное число узлов. Следовательно, если располагать собственные функции по порядку возрастающих собственных энергий, то четные и нечетные функции чередуются, причем функция основного состояния всегда четная. Результаты § 5 подтверждают эти выводы.

2. *Собственное значение E вырождено.* В этом случае все функции могут быть представлены в виде $\lambda\psi + \mu\varphi$, где ψ и φ — две линейно независимые собственные функции. Предположим, что хотя бы одна из этих функций, например ψ , не имеет определенной четности; в этих условиях ни одна из функций $\psi_+ = \psi(x) + \psi(-x)$ и $\psi_- = \psi(x) - \psi(-x)$ не обращается тождественно в нуль. Эти две функции противоположной четности обязательно линейно независимы и, как мы видели, являются собственными функциями одного собственного значения E . Поэтому можно выразить ψ , φ и, следовательно, $\lambda\psi + \mu\varphi$ в виде линейной комбинации ψ_+ и ψ_- . Таким образом, всегда можно выразить собственные функции вырожденного собственного значения в виде линейной комбинации двух функций, имеющих определенную четность.

Можно, впрочем, убедиться в результате простого исследования, что собственные значения непрерывного спектра все двукратно вырождены и каждому из них соответствует одна собственная функция четная (производная функции равна нулю в начале координат) и одна функция нечетная (функция равна нулю в начале координат).

В квантовой механике часто случается, что гамильтониан исследуемой системы оказывается инвариантным относительно некоторых преобразований; из этого свойства инвариантности следуют некоторые свойства симметрии, характеризующие собственные функции уравнения Шредингера. Четность дает нам простой пример такой ситуации.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. В задаче о потенциальной яме, определенной в § 6, вычислить постоянные P , Q , R , S , фигурирующие в выражении (22) для решения χ , как функции параметров ямы, проверить выражение (23) для коэффициента прохождения и соотношение сохранения (24). Предполагая, что $KL \gg \pi$ и $\varphi <$

$\ll \eta \ll 1$, вычислить «время прохождения» проходящей волны и «время отражения» отраженной волны, обнаружить наличие резонансов и сравнить движение проходящей волны с движением соответствующей классической частицы.

2. Вычислить коэффициент прохождения для прямоугольного барьера, определенного в § 7. Вычислить «время прохождения» проходящей волны и сравнить движение этой части волны с движением классической частицы.

3. Изучить движение частицы в прямоугольном потенциале, включающем бесконечно высокий барьер при $x < 0$, а при положительных x имеющем форму

$$V(x) = V_I \quad 0 < x < a,$$

$$V(x) = V_{II} \quad a < x < b,$$

$$V(x) = 0 \quad x > b$$

Предполагается, что $V_I < 0 < V_{II}$. Сравнить движение волнового пакета, испытывающего отражение в точке $x = 0$, с движением соответствующей классической частицы. Исследовать, в частности, «запаздывание отражения», когда начальная энергия частицы E меньше V_{II} .

Обнаружить резонансы и выяснить связь между шириной этих резонансов и запаздыванием отражения в пределе, когда $E \ll V_{II}$ и когда $(b - a) \sqrt{2mV_{II}} \gg \hbar$

4. Спектр энергии частицы, движущейся в одном измерении в некотором потенциале, содержит, вообще говоря, дискретную часть. Показать, что при расположении собственных состояний дискретного спектра по возрастающим значениям энергии собственные функции располагаются по возрастающему числу узлов, причем n -ая собственная функция имеет $n - 1$ узел; между каждыми двумя узлами располагается по крайней мере один узел собственных функций с более высокими номерами.

5. Частица в одном измерении подвергается в интервале $(0, \infty)$ действию потенциала $V(x)$, асимптотически стремящегося к нулю, причем в точке $x = 0$ имеется бесконечно высокий отталкивающий барьер. Показать, что число связанных состояний равно числу узлов решения уравнения Шредингера, обращаемого в нуль в начале координат и соответствующего бесконечно малой отрицательной энергии.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ
КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОГО ДУАЛИЗМА
И СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

§ 1. Введение

Исследуя фундаментальные причины расхождений между экспериментальными фактами атомной физики и предсказаниями классической теории, можно выделить два основных аспекта микроскопических явлений самого общего характера.

Первый из них, названный нами *атомизмом действия*, приводит к нарушению непрерывности течения процессов на микроскопическом уровне: изменения действия физической системы, обмен действием между физическими системами могут происходить только в форме *дискретных и неделимых квантов*. Мы подробно обсуждали это новое понятие в первой главе и выяснили, что описание явлений в рамках классической теории может быть успешным только в том случае, когда величина кванта действия может рассматриваться как пренебрежимо малая.

Второй аспект поведения микроскопических объектов связан с присущим им *корпускулярно-волновым дуализмом*, т. е. способностью в различных экспериментальных условиях проявлять различные и противоречивые свойства волны и частицы. Эта двойственность поведения тесно связана с атомизмом действия, на что указывает появление постоянной $\hbar$ в общих формулах соответствия (II.5) между волнами и частицами. Мы видели, что общий характер двойственного поведения микроскопических объектов был понят довольно поздно и сыграл решающую роль в построении квантовой теории физических систем.

Анализ результатов дифракционных опытов (см. гл. I, § 5 и 6, гл. II, § 7 и 8) показывает, что наиболее простое мыслимое столкновение дуализма волна — частица может быть проведено на статистической основе, т. е. на основе предположения, что вероятность нахождения частицы в некоторой области пространства пропорциональна интенсивности волны в этой области. В этой главе мы уточним указанную статистическую интерпретацию, проверим ее внутреннюю согласованность, а также согласие с экспериментальными результатами.

В первом разделе будет развита статистическая интерпретация волновой функции как основного понятия волновой механики систем материальных частиц. Результаты этого раз-

дела позволят нам во втором разделе вывести соотношения неопределенности Гейзенберга как следствие статистической интерпретации корпускулярно-волнового дуализма. Далее, в разделе III мы покажем, что эти соотношения, сколь бы они ни казались странными на первый взгляд, вполне согласуются с опытом, если учесть, что измерительные приборы также являются квантовыми объектами, подчиняющимися тем же соотношениям, и что поэтому возмущение, вводимое в состояние измеряемого объекта вмешательством измерительного прибора, не может быть сделано ни сколь угодно малым, ни полностью контролируемым.

Говоря точно, на микроскопическом уровне нельзя строго разделить измеряемый объект и измерительный прибор. В то же время, когда в обычных условиях говорят о некоторой процедуре измерения, то всегда неявно предполагают возможность провести четкое различие между объектом измерения и всеми теми приспособлениями, которые служат для производства измерения. На микроскопическом уровне вмешательство измерительного аппарата вносит неконтролируемое возмущение, конечная величина которого непосредственно связана с существованием атомизма действия. Наличие неконтролируемого возмущения ставит предел возможности различать субъект и объект и ведет к пересмотру классических концепций, касающихся описания явлений. Этот вопрос рассматривается в разделе IV этой главы.

Раздел I. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 2. Вероятности результатов измерения координаты и импульса частицы

Разберем вначале случай квантовой системы, состоящей из одной частицы. Пусть $\Psi(\mathbf{r}, t)$ есть ее волновая функция. Она удовлетворяет уравнению Шредингера и полностью определяется в любой момент времени, если известно значение $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ в начальный момент t_0 . Сейчас мы анализируем ситуацию в некоторый данный момент времени t , и обозначим через $\Psi(\mathbf{r})$ волновую функцию частицы в этот момент.

Динамическое состояние классической частицы определяется в каждый момент заданием ее положения $\mathbf{r}(x, y, z)$ и импульса $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$. Но поскольку волновая функция имеет некоторую пространственную протяженность, мы не можем приписывать квантовой частице точное положение в пространстве. Можно говорить лишь о вероятности найти частицу в некоторой области пространства, когда производится измерение ее положения. Обозначим символом $P(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ вероятность найти частицу в

элементе объема $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$, тогда вероятность найти ее в объеме V мы получим интегрированием «плотности вероятности» $P(\mathbf{r})$ по этому объему: $P(V) = \int_V P(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. Подобно этому мы, вообще

говоря, не можем приписать квантовой частице точно заданный импульс. Конечно, если сопоставляемая частице волна является плоской волной $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, то она, по закону соответствия де Бройля, действительно представляет частицу с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Однако в общем случае волна Ψ представляет собой суперпозицию многих плоских волн с различными волновыми векторами $\mathbf{k}$. Поэтому можно определить только вероятности того, что измеряемый импульс окажется в некоторой области пространства импульсов. Обозначим символом $\Pi(\mathbf{p})d\mathbf{p}$ вероятность найти импульс частицы в интервале $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$, тогда вероятность $\Pi(D)$ найти импульс в некоторой конечной области D импульсного пространства получится интегрированием: $\Pi(D) = \int_D \Pi(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$. Плотности вероятности $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ яв-

ляются величинами существенно положительными и должны удовлетворять очевидным условиям

$$\int P(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1, \quad \int \Pi(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1, \quad (1)$$

где интегрирование распространяется на все конфигурационное и импульсное пространства, соответственно.

Распределения вероятности $P(\mathbf{r})$, $\Pi(\mathbf{p})$ должны быть полностью заданы, если известна волновая функция $\Psi(\mathbf{r})$. Определим $P(\mathbf{r})$ равенством

$$P(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (2)$$

Эта формула вполне согласуется с высказанной ранее идеей о том, что вероятность нахождения частицы в точке должна быть тем больше, чем больше интенсивность волны в этой точке.

Выполнение равенства (1) требует, чтобы волновая функция подчинялась так называемому *условию нормировки*

$$N \equiv \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (3)$$

Это предполагает, что функция $\Psi(\mathbf{r})$ является квадратично интегрируемой, причем ее норма остается постоянной во времени. Мы покажем в дальнейшем, что это условие согласованности статистической интерпретации действительно выполняется.

Чтобы определить $\Pi(\mathbf{p})$, рассмотрим операцию измерения импульса частицы, сопоставляемой волне Ψ . Эта проблема аналогична спектральному анализу световой волны, причем

аналогия становится особенно ясной, если измерение импульса производится с помощью некоторого дифракционного устройства; однако все рассуждения имеют общий характер и не зависят от конкретного устройства измерительного аппарата. Введем преобразование Фурье волновой функции согласно соотношениям ¹⁾

$$\Phi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(r) e^{-i\frac{pr}{\hbar}} dr, \quad (4)$$

$$\Psi(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Phi(p) e^{i\frac{pr}{\hbar}} dp. \quad (5)$$

Следуя уравнению (5) функцию $\Psi(r)$ можно рассматривать как линейную суперпозицию элементарных волн $e^{i\frac{pr}{\hbar}}$ с точно определенным импульсом p , причем каждая элементарная волна входит с коэффициентом $(2\pi\hbar)^{-3/2}\Phi(p)$. Если бы эта суперпозиция содержала только один член $e^{i\frac{p_0 r}{\hbar}}$, то результат измерения был бы равен p_0 . Если $\Phi(p)$ отлична от нуля только в малой области, окружающей p_0 , как в случае волновых пакетов, изучавшихся в гл. II, то значение импульса почти наверняка находится вблизи p_0 . В общем случае можно сказать, что вероятность $\Pi(p)dp$ найти значение импульса в элементе объема $(p, p+dp)$ тем больше, чем больше $|\Phi(p)|$. Таким образом, мы можем положить

$$\Pi(p) = \Phi^*(p)\Phi(p) = |\Phi(p)|^2. \quad (6)$$

Поскольку скалярное произведение инвариантно относительно преобразования Фурье (теорема IV, см. Дополнение А § 16; в дальнейшем будем обозначать, например, § А. 16, § Б. 9 и т. д.):

$$\int |\Phi(p)|^2 dp = \int |\Psi(r)|^2 dr,$$

условие нормировки (1) автоматически удовлетворяется, если функция $\Psi(r)$ нормирована на единицу.

Преобразование Фурье устанавливает взаимоднозначное соответствие между функциями $\Psi(r)$ и $\Phi(p)$. Задания функции $\Phi(p)$, подобно заданию функции $\Psi(r)$, достаточно для определения динамического состояния частицы. Поэтому $\Phi(p)$ назы-

¹⁾ Если интегралы в правых частях равенств (4) и (5) не сходятся в обычном смысле, то понятие сходимости должно быть модифицировано согласно предписаниям теоремы I Дополнения А (§ 16) при учете того обстоятельства, что функция $\Psi(r)$ всегда должна быть квадратично интегрируемой. Последующие результаты не зависят от определения сходимости.

вают *волновой функцией в импульсном пространстве*, что оправдывается еще и тем, что Ψ и Φ играют в определениях (2) и (6) вполне аналогичную роль. Иногда говорят, что функции Ψ и Φ являются эквивалентными *представлениями* одного динамического состояния.

Следует четко представлять себе физический смысл введенных нами величин $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$. Частица, сопоставляемая волне, вообще говоря, не обладает ни определенным положением, ни определенным импульсом; если производить измерение той или иной динамической переменной в отдельной системе, представляемой волновой функцией Ψ , то никаких предсказаний результата сделать нельзя. Вероятностные предсказания, о которых шла речь выше, относятся к ансамблю из очень большого числа $\mathcal{N}$ эквивалентных систем, не зависящих друг от друга, каждая из которых представляется одной и той же волновой функцией Ψ . Если производить в каждой из этих систем измерение пространственного положения, то величина $P(\mathbf{r})$ дает вероятность распределения $\mathcal{N}$ результатов измерения в предельном случае, когда число $\mathcal{N}$ членов статистического ансамбля стремится к бесконечности. Если измеряется импульс, то величина $\Pi(\mathbf{p})$ при тех же условиях дает распределение результатов измерения импульса.

Чтобы определить $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$, исходя из волновой функции, мы основывались на соображениях правдоподобности и внутренней логики определения. Но совершенно не очевидно, что выражения (2) и (6) являются единственными, которые можно получить путем подобных рассуждений. Распределения вероятности $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ могут быть в принципе непосредственно сопоставлены с опытными данными. Выражения (2) и (6) получают окончательное подтверждение, если результат такого сопоставления окажется удовлетворительным.

§ 3. Сохранение нормы во времени

Чтобы определения вероятностей, данные выше, были справедливы, необходимо, чтобы норма N волновой функции оставалась постоянной во времени. Но функции Ψ и Ψ^* удовлетворяют соответственно уравнению Шредингера (II.33) и комплексно сопряженному уравнению, т. е.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = -(H\Psi)^*.$$

Следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \Psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \Psi = \frac{1}{i\hbar} [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi]. \quad (7)$$

Интегрируя обе стороны равенства по всему конфигурационному пространству, получаем

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi] dr.$$

Норма будет оставаться постоянной во времени, если

$$\int \Psi^* (H\Psi) dr = \int (H\Psi)^* \Psi dr. \quad (8)$$

Это равенство должно выполняться каким бы ни было динамическое состояние частицы, т. е. для всякой функции Ψ , квадратично интегрируемой в пространстве конфигураций.

В математике операторы, удовлетворяющие соотношению (8) для всякой функции Ψ из функционального пространства, где определен оператор, называются *эрмитовыми* операторами. Основные свойства эрмитовых операторов будут изучены в гл. V.

Проверим, что гамильтониан Шредингера действительно обладает свойством эрмитовости. Ограничимся здесь случаем частицы, находящейся в области действия скалярного потенциала (случай заряженной частицы в электромагнитном поле является предметом задачи 1). Имеем

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r).$$

Поскольку $V(r)$ есть величина действительная, уравнение (8) в данном случае принимает вид

$$\int [\Psi^* (\Delta\Psi) - (\Delta\Psi)^* \Psi] dr = 0.$$

Если бы интегрирование распространялось на некоторый конечный объем, ограниченный поверхностью S , то по известной теореме Грина объемный интеграл был бы равен интегралу по поверхности

$$\int_S \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dn} - \frac{d\Psi^*}{dn} \Psi \right) dS,$$

где символом d/dn обозначена внешняя нормальная производная. В нашем случае интегрирование распространяется на все конфигурационное пространство, т. е. все элементы поверхности S удаляются в бесконечность. В то же время, поскольку Ψ представляет динамическое состояние физической системы, она есть функция квадратично интегрируемая, следовательно, поверхностный интеграл стремится к нулю.

Таким образом, если условие нормировки (3) выполняется в начальный момент времени, оно выполняется и во все последующие моменты времени. Ввиду того, что уравнение Шредин-

гера есть однородное уравнение, его решения определены только с точностью до произвольного постоянного комплексного множителя. Условие нормировки в начальный момент времени фиксирует абсолютное значение этого множителя; фаза комплексного постоянного множителя остается произвольной.

§ 4. Понятие потока

Свойство сохранения нормы легко интерпретировать, если ввести понятие потока. Правая часть уравнения (7) всегда может быть выражена в виде дивергенции некоторого вектора — вектора плотности потока вероятности или просто *вектора потока*. Ограничимся здесь случаем частицы, движущейся в поле скалярного потенциала (см. задачу 1). Определим поток $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t выражением

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left[\Psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi \right]. \quad (9)$$

Нетрудно проверить, что

$$\text{div } \mathbf{J} = \frac{i}{\hbar} [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi]. \quad (10)$$

Это позволяет переписать уравнение (7) в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \text{div } \mathbf{J} = 0. \quad (11)$$

Уравнение типа (11) часто встречается в гидродинамике. Это есть уравнение сохранения для жидкости с плотностью P и потоком $\mathbf{J}$ в среде без поглощения, без источников и стоков. Мы приходим, таким образом, к аналогии между движением квантовой частицы и классической жидкости²⁾. Масса жидкости, содержащаяся в заданном объеме $\mathcal{V}$, равна интегралу от плотности по этому объему. Из уравнения (11) вытекает тот общеизвестный факт, что производная по времени от массы жидкости, заключенной в $\mathcal{V}$, равна

$$-\int_{\mathcal{V}} \text{div } \mathbf{J} d\mathbf{r} = -\int_S \mathbf{J} d\mathbf{S},$$

т. е. потоку вектора $\mathbf{J}$ через замкнутую поверхность S , ограничивающую объем. Полная масса жидкости во всем пространстве остается постоянной (сохранение нормы), так как поток через поверхность S стремится к нулю, когда объем $\mathcal{V}$ включает все пространство.

²⁾ Конечно эта аналогия не может быть распространена слишком далеко. Все, что можно получить на основе этой аналогии, сводится к закону сохранения, выражаемому, уравнением (11) (см. гл. VI).

В определении J сохраняется некоторая степень произвола: уравнение (11) остается справедливым, если к вектору J прибавить любой вектор с равной нулю дивергенцией. Однако определение (9) имеет преимущество простоты. Кроме того, оно может быть получено по принципу соответствия из классического определения потока. Действительно, согласно принципу соответствия, оператор $(\hbar/im)\nabla$ представляет величину p/m , т. е. скорость частицы; величина J соответствует произведению скорости на плотность, т. е. потоку. В частности, если Ψ есть плоская волна $A \exp[(i/\hbar)(pr - Et)]$, то $J(r, t) = |A|^2(p/m)$ действительно равно произведению плотности вероятности на скорость.

Свойство, выражаемое уравнением (11), есть нечто более глубокое, чем просто свойство сохранения нормы. Если функция Ψ является стационарным решением уравнения Шредингера

$$\Psi(r, t) = \psi(r) e^{-i \frac{E}{\hbar} t},$$

то свойство сохранения нормы либо тривиально, либо не имеет смысла. Оно тривиально в случае связанного состояния, оно не имеет смысла в случае состояния несвязанного, ибо во втором случае функция ψ не является квадратично интегрируемой. Однако в обоих случаях уравнение (11) остается справедливым и, ввиду того, что плотность $|\psi|^2$ не зависит от времени, принимает форму

$$\operatorname{div} J = 0. \quad (12)$$

Это свойство собственной функции ψ особенно важно, так как оно не зависит от конкретной формы потенциала $V(r)$, входящего в гамильтониан Шредингера³⁾.

§ 5. Средние значения функций от r и от p

Убедившись в согласованности определений плотностей вероятности P и Π , применим их теперь к вычислению средних значений функций от r и от p .

Зная распределение $P(r)$ результатов измерения положения в некоторый момент времени, можно определить среднее значение (математическое ожидание) для некоторой функции $F(r) = F(x, y, z)$ координат частицы. Физический смысл этого среднего значения совпадает с тем, который мы формулировали при определении $P(r)$: это среднее значение измерений $F(r)$, осуществленных на очень большом числе $\mathcal{N}$ эквивалентных систем,

³⁾ Это свойство играет в трехмерных задачах роль свойства сохранения вронскиана $W(y^*, y)$ в задачах одномерных (см. III, § 11, в дальнейшем § III, 11).

независимых друг от друга и представляемых одной и той же волновой функцией Ψ .

Примем для этой величины обозначение $\langle F(\mathbf{r}) \rangle$. Очевидно, что

$$\langle F(\mathbf{r}) \rangle = \int P(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Аналогично для среднего значения некоторой функции импульса $G(\mathbf{p}) = G(p_x, p_y, p_z)$ получим

$$\langle G(\mathbf{p}) \rangle = \int \Pi(\mathbf{p}) G(\mathbf{p}) d\mathbf{p}.$$

Используя определения плотностей вероятности, принятые в § 2, получим выражения (при условии, что интегралы сходятся)

$$\langle F(\mathbf{r}) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (13)$$

$$\langle G(\mathbf{p}) \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p}) G(\mathbf{p}) \Phi(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (14)$$

Так, среднее значение координаты частицы есть

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}) x \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (15)$$

а среднее значение составляющей p_x импульса есть

$$\langle p_x \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{p}) p_x \Phi(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (16)$$

Запишем выражение (16) в другой форме, применяя свойства преобразования Фурье, изложенные в Дополнении А. Если функция $p_x \Phi(\mathbf{p})$ квадратично интегрируема, что мы предположим выполняющимся всегда, ее образ Фурье есть $(\hbar/i) \partial \Psi(\mathbf{r}) / \partial x$ (теорема III § А.16). Применяя к функциям Φ и $p_x \Phi$ свойство инвариантности скалярного произведения (теорема IV § А.16), получаем

$$\langle p_x \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar \partial}{i \partial x} \right) \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (17)$$

Мы видим формальную аналогию между правыми частями уравнений (16) и (17): переход от первого ко второму осуществляется заменой интегрирования по $\mathbf{p}$ интегрированием по $\mathbf{r}$, подстановкой вместо $\Phi(\mathbf{p})$ ее обратного Фурье-образа $\Psi(\mathbf{r})$, а вместо $\Phi^*(\mathbf{p})$ — комплексно сопряженной величины и, наконец, заменой величины p_x оператором $(\hbar/i) \partial / \partial x$, причем $\partial / \partial x$ обозначает операцию взятия частной производной по x , применяемую к функции, стоящей справа от символа оператора.

Аналогично можно перейти от уравнения (15) к выражению

$$\langle x \rangle = \int \Phi^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \right) \Phi(p) dp. \quad (18)$$

Эти результаты могут быть обобщены на функции более сложной формы. Так, из того факта, что $p_x^2 \Phi(p)$ (по предположению квадратично интегрируемая) есть образ Фурье функции

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(r) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

(повторное применение теоремы III § A.16), выводим

$$\langle p_x^2 \rangle = \int \Phi^* p_x^2 \Phi dp = -\hbar^2 \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dr. \quad (19)$$

Вообще, если $G(p)$ есть полином или функция, представляемая абсолютно сходящимся рядом по степеням p_x, p_y, p_z , имеем

$$\langle G(p) \rangle = \int \Psi^*(r) G\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_r\right) \Psi(r) dr \quad (20)$$

при условии выполнения требований сходимости, которые легко формулировать. При выполнении тех же условий для среднего значения $F(r)$ находим

$$\langle F(r) \rangle = \int \Phi^*(p) F(i\hbar \nabla_p) \Phi(p) dp. \quad (21)$$

Получив достаточно результатов, чтобы начать общее обсуждение проблемы, которое является предметом этой главы, мы не будем более углублять здесь вопросы статистической интерпретации функции Ψ . Ведь помимо статистики измерений положения и импульса и результатов, касающихся средних значений величин типа $F(r)$ и $G(p)$, задание Ψ должно определить статистику измерения любой измеримой физической величины. Эти вопросы будут рассматриваться в гл. V. Здесь мы ограничимся некоторыми предварительными замечаниями.

Величины $\langle x \rangle$ и $\langle p_x \rangle$ действительны; это следует из их определения. Поэтому правые части уравнений (15) и (17) также действительны. Иными словами, операторы x и $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ являются эрмитовыми операторами (это следует из самого определения эрмитовости в уравнении (8)). Аналогично две другие составляющие вектора r и две другие составляющие векторного оператора $-i\hbar \nabla$ являются эрмитовыми операторами, а также и операторы вида $F(r)$, $G(-i\hbar \nabla)$, если F и G как функции своих аргументов действительны.

Рассмотрим выражения для средних значений, полученных с помощью функции Ψ (уравнения (13), (20), (15) и (17)). Все они имеют одну форму. Величине, среднее значение которой мы вычисляем, соответствует некоторый линейный оператор

(эрмитов) A , и искомое среднее дается выражением вида

$$\int \Psi^* A \Psi dr, \quad (22)$$

в котором, согласно общему правилу, оператор действует на функцию, стоящую справа от него. Этот оператор получается с помощью простого правила соответствия: если речь идет о функции $F(\mathbf{r})$ координат частицы, то соответствующим оператором является сама функция; если же мы имеем функцию $G(\mathbf{p})$, то оператор получается из этой функции подстановкой в G вместо составляющих $\mathbf{p}$ соответствующих составляющих векторного оператора $-\hbar \nabla$. Мы вновь встречаем здесь правило соответствия (II.17) между импульсом $\mathbf{p}$ и оператором $-\hbar \nabla$, которое нам помогло установить уравнение Шредингера.

Каждое из средних значений может быть вычислено с помощью Ψ или с помощью Φ : выражения (21), (14), (18), (16), построенные с помощью функции Φ , соответственно эквивалентны выражениям (13), (20), (15), (17), в которые входит функция Ψ . Между первым и вторым рядом формул имеется и формальная аналогия. Во втором случае величине, среднее значение которой вычисляется, также соответствует линейный (эрмитов) оператор B , действующий в данном случае на функции от $\mathbf{p}$, и искомое среднее дается выражением типа

$$\int \Phi^* B \Phi d\mathbf{p}. \quad (23)$$

Оператор B получается на основе правила соответствия, сходного с тем, которое служит для нахождения A : если речь идет о функции $G(\mathbf{p})$, то оператором является сама функция, если же мы имеем функцию $F(\mathbf{r})$, то оператор получается подстановкой в F вместо $\mathbf{r}$ оператора $\hbar \nabla_p$ ($\nabla_p \equiv (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)$).

Как волновые функции Φ и Ψ являются эквивалентными представлениями одного и того же динамического состояния частицы, так и операторы B и A являются эквивалентными представлениями одной и той же физической величины, причем вычисление рассмотренных здесь средних значений может производиться формально тождественно в том или другом из этих представлений. Это наводит на мысль, что квантовая теория может быть формулирована самым общим образом независимо от конкретного представления. Такая общая формулировка будет дана в гл. VII и VIII.

§ 6. Системы многих частиц

Определения и результаты предшествующего рассмотрения без труда могут быть распространены на случай квантовых систем, состоящих из многих частиц.

Пусть в самом общем случае $\Psi(q_1, \dots, q_R; t)$ есть волновая функция квантовой системы в R -мерном пространстве, причем динамическими переменными системы являются R координат $q_1, \dots, q_R$ и R канонически сопряженных импульсов $p_1, \dots, p_R$. Предположим, что мы имеем дело с декартовыми координатами, и обозначим с помощью $d\tau = dq_1 \dots dq_R$ и $d\omega = dp_1 \dots dp_R$ элементы объемов в q - и p -пространствах соответственно. Волновая функция в p -пространстве есть

$$\Phi(p_1, \dots, p_R; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{R/2}} \int \Psi(q_1, \dots, q_R; t) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_i p_i q_i} d\tau;$$

$|\Psi|^2 d\tau$ есть вероятность найти координаты q в области $(\tau, \tau + d\tau)$; $|\Phi|^2 d\omega$ есть вероятность найти импульсы p в области $(\omega, \omega + d\omega)$. Исходя из этого, можно повторить все рассуждения предшествующих параграфов.

Рассмотрим в качестве примера систему из двух частиц. Пусть $\mathbf{r}_1(x_1, y_1, z_1)$, $\mathbf{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ суть векторы положения, а $\mathbf{p}_1(p_x, p_y, p_z)$, $\mathbf{p}_2(p_x, p_y, p_z)$ — векторы импульсов частиц соответственно. Величина $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ есть вероятность найти частицу 1 в элементе объема $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + d\mathbf{r}_1)$ и частицу 2 — в элементе объема $(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 + d\mathbf{r}_2)$. Величина $\Pi(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2$ есть вероятность найти импульс частицы 1 в интервале $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1 + d\mathbf{p}_1)$ и импульс частицы 2 — в интервале $(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_2 + d\mathbf{p}_2)$. Можно ввести также плотность вероятности присутствия частицы 1 в точке $\mathbf{r}_1$, $P_1(\mathbf{r}_1)$, если положение второй частицы не фиксировано; эта величина есть статистическое распределение, получаемое при измерении положения частицы 1 без учета положения частицы 2. Очевидно, что

$$P_1(\mathbf{r}_1) = \int P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2.$$

Сходным образом можно ввести плотности вероятности $P_2(\mathbf{r}_2)$, $\Pi_1(\mathbf{p}_1)$, $\Pi_2(\mathbf{p}_2)$. Все эти статистические распределения являются существенно положительными величинами, удовлетворяющими условиям нормировки

$$\iint P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 1, \dots, \int \Pi_2(\mathbf{p}_2) d\mathbf{p}_2 = 1$$

(символ $\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ означает шестикратный интеграл, распространенный на все конфигурационное пространство, символ $\int d\mathbf{p}_2$ — тройной интеграл, распространенный на импульсное пространство частицы 2 и т. д.).

Динамическое состояние системы из двух частиц в данный момент времени определяется волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$,

взятой в тот же момент времени. С помощью преобразования Фурье мы получаем волновую функцию в импульсном пространстве:

$$\Phi(p_1, p_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint e^{-i(p_1 r_1 + p_2 r_2)/\hbar} \Psi(r_1, r_2) dr_1 dr_2,$$

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint e^{i(p_1 r_1 + p_2 r_2)/\hbar} \Phi(p_1, p_2) dp_1 dp_2.$$

Обобщениями определений (2) и (6) очевидно являются следующие соотношения:

$$P(r_1, r_2) = |\Psi(r_1, r_2)|^2, \quad \Pi(p_1, p_2) = |\Phi(p_1, p_2)|^2, \quad (24)$$

причем условия нормировки вероятностей приводят к условию нормировки волновых функций

$$\iint |\Psi(r_1, r_2)|^2 dr_1 dr_2 = \iint |\Phi(p_1, p_2)|^2 dp_1 dp_2 = 1.$$

Это условие нормировки действительно может быть реализовано *в каждый момент времени*, если гамильтониан, входящий в уравнение Шредингера, является эрмитовым оператором. Легко проверить, что дело обстоит именно так. Волновые функции Ψ и Φ , таким образом, определяются с точностью до произвольного постоянного фазового множителя.

Из указанных определений можно получить и другие распределения, введенные выше. Так, например,

$$P_1(r_1) = \int |\Psi(r_1, r_2)|^2 dr_2.$$

Аналогичным путем вводятся определения средних значений функций $F(r_1, r_2)$ и $G(p_1, p_2)$ координат или импульсов двух частиц. Так, например,

$$\langle x_1 \rangle = \iint \Psi^* x_1 \Psi dr_1 dr_2 = -\frac{\hbar}{i} \iint \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial p_{x_1}} dp_1 dp_2,$$

$$\langle p_{x_2} \rangle = \iint \Phi^* p_{x_2} \Phi dp_1 dp_2 = \frac{\hbar}{i} \iint \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} dr_1 dr_2.$$

Все замечания, сделанные в конце § 5 сохраняют свою силу.

Когда волновая функция $\Psi(r_1, r_2)$ представима в виде произведения двух функций (факторизуется)

$$\Psi(r_1, r_2) = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2)$$

(при этом $\Psi_1(r_1)$ и $\Psi_2(r_2)$ предполагаются нормированными на единицу), то и волновая функция в пространстве импульсов и распределения P и Π также оказываются факторизованными:

$$P(r_1, r_2) = P_1(r_1) P_2(r_2), \quad \Pi(p_1, p_2) = \Pi_1(p_1) \Pi_2(p_2).$$

Это следует непосредственно из самого определения этих величин. Мы видим, что в этом случае не существует никаких корреляций между статистическими распределениями результатов измерений, проведенных для каждой из этих частиц. Статистические предсказания о результатах измерения величин, относящихся, например, к частице 1, будут такими, как если бы она находилась в динамическом состоянии, определяемом волновой функцией $\Psi_1(\mathbf{r}_1)$. Нетрудно проверить, что $P_1(\mathbf{r}_1) = |\Psi_1(\mathbf{r}_1)|^2$ и $\Pi_1(\mathbf{p}_1) = |\Phi_1(\mathbf{p}_1)|^2$, где $\Phi_1(\mathbf{p}_1)$ есть волновая функция в пространстве импульсов, соответствующая Ψ_1 . Во всех вычислениях, касающихся измерений, проведенных с этой частицей (средние значения, флуктуации и т. д.), можно просто игнорировать существование второй частицы и рассматривать только одну частицу с волновой функцией $\Psi_1(\mathbf{r}_1)$.

Если две частицы не взаимодействуют между собой или по той или иной причине мы можем пренебречь этим взаимодействием, то свойство факторизации волновой функции сохраняется с течением времени. Действительно, гамильтониан системы в этом случае может быть записан в виде суммы двух членов: $H = H_1 + H_2$, из которых первый — H_1 действует только на функции переменной $\mathbf{r}_1$, а второй — H_2 — на функции переменной $\mathbf{r}_2$. Предположим, что в начальный момент времени

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_0) = \Psi_1(\mathbf{r}_1, t_0) \Psi_2(\mathbf{r}_2, t_0)$$

и пусть $\Psi_1(\mathbf{r}_1, t)$ и $\Psi_2(\mathbf{r}_2, t)$ являются решениями уравнений Шредингера

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_1 \right] \Psi_1 = 0, \quad \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_2 \right] \Psi_2 = 0$$

с начальными условиями $\Psi_1(\mathbf{r}_1, t_0)$ и $\Psi_2(\mathbf{r}_2, t_0)$ соответственно. Факторизованная волновая функция

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = \Psi_1(\mathbf{r}_1, t) \Psi_2(\mathbf{r}_2, t)$$

удовлетворяет уравнению Шредингера системы, так как

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi &= i\hbar \left(\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} \Psi_2 + \Psi_1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \right) = (H_1 \Psi_1) \Psi_2 + \Psi_1 (H_2 \Psi_2) = \\ &= H_1 \Psi_1 \Psi_2 + H_2 \Psi_1 \Psi_2 = (H_1 + H_2) \Psi_1 \Psi_2 = H \Psi. \end{aligned}$$

Движения каждой из частиц, как этого и следовало ожидать, остаются совершенно независимыми, так что никаких корреляций между статистическими распределениями измерений, проведенных над каждой из них, ни в какой момент времени не возникает.

Раздел II. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

§ 7. Соотношения неопределенности координата-импульс квантовой частицы

Вернемся к определениям вероятностей § 2. Распределения $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$, будучи определены на основе одной и той же волновой функции $\Psi(\mathbf{r})$, не являются независимыми друг от друга, хотя функция $\Psi(\mathbf{r})$ может *a priori* быть любой функцией с интегрируемым квадратом. Одно из этих распределений всегда может быть выбрано произвольно с помощью соответствующего выбора функции Ψ : если, например, мы задаемся некоторым распределением $P(\mathbf{r})$, то достаточно выбрать волновую функцию с абсолютным значением, равным $\sqrt{P}$, а именно $\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{P(\mathbf{r})} e^{i\alpha(\mathbf{r})}$, при этом фаза $\alpha(\mathbf{r})$ остается, конечно, полностью неопределенной. Но с помощью соответствующего выбора $\alpha(\mathbf{r})$ мы уже не можем получить любое наперед заданное распределение $\Pi(\mathbf{p})$, хотя $\Pi(\mathbf{p})$, рассматриваемое как функционал $\alpha(\mathbf{r})$, может изменяться в достаточно широких пределах. Тот факт, что всегда существует некоторая корреляция между распределениями $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ является характерным для квантовой теории⁴⁾. Эта корреляция количественно выражается соотношениями неопределенности Гейзенберга.

Рассмотрим для начала частицу в одном измерении. Пусть x есть ее координата, а p — импульс и пусть $\psi(x)$ и

$$\varphi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

суть волновые функции, представляющие ее динамическое состояние в пространстве x и пространстве p соответственно.

⁴⁾ В этом пункте имеется существенное отличие между статистическими распределениями $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ и соответствующими распределениями $P_{\text{кл}}(\mathbf{r})$ и $\Pi_{\text{кл}}(\mathbf{p})$ в классической статистической механике, сходства с которыми можно было бы искать. Эти последние получаются с помощью плотности в фазовом пространстве $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p})$:

$$P_{\text{кл}}(\mathbf{r}) = \int \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad \Pi_{\text{кл}}(\mathbf{p}) = \int \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r}.$$

Здесь $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ есть положительная функция, подчиняющаяся условию $\iint \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = 1$. В классической статистической механике можно одновременно произвольно выбирать распределения $P_{\text{кл}}(\mathbf{r})$ и $\Pi_{\text{кл}}(\mathbf{p})$; действительно, существует по крайней мере одна плотность в фазовом пространстве $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = P_{\text{кл}}(\mathbf{r})\Pi_{\text{кл}}(\mathbf{p})$, позволяющая это сделать.

Результат Гейзенберга опирается на тот математический факт, что протяженность волны ψ и ее образа Фурье φ в соответствующих пространствах не могут одновременно быть сделаны произвольно малыми. Если волна ψ занимает область порядка Δx в пространстве x , а волна φ — область порядка Δp в пространстве p , то произведение $\Delta x \Delta p$ остается все время больше некоторой величины порядка $\hbar$

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar. \quad (25)$$

Этот результат мы уже встречали при построении волновых пакетов в теории волн вещества. Он проявился также, хотя и не столь явным образом, при обсуждении эволюции волновых пакетов, построенных с помощью состояний непрерывного спектра, в гл. III.

В справедливости соотношения (25) можно убедиться путем следующих полуколичественных рассуждений, которые только перефразируют аргументы, приведенные на стр. 60. Любая волна $\psi(x)$ может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн e^{ikx} с длиной волны $2\pi/k$. Пусть Δk характеризует размер области изменения параметра k в этой суперпозиции. Чтобы волна $\psi(x)$ оказалась локализованной в пространственной области Δx , необходимо, чтобы «конструктивное» согласие между фазами различных волн в суперпозиции осуществлялось именно в этой области, а вне ее интерференция между волнами должна иметь «деструктивный» характер. Число длин волн $2\pi/k$, содержащихся в Δx , равно $k\Delta x/2\pi$. Чтобы различные плоские волны, формирующие $\psi(x)$, могли взаимно погашать друг друга на границах интервала Δx , необходимо, чтобы это число волн изменялось по крайней мере на единицу, когда k пробегает область своего изменения, т. е. должно выполняться условие $\Delta x \Delta k \gtrsim 2\pi$. Поскольку дело идет только о порядке величин, опустим множитель 2π и напишем просто

$$\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1.$$

Отсюда, используя соотношение между импульсом и волновым вектором ($p = \hbar k$), получаем неравенство (25).

Обычно величины Δx и Δp называются неопределенностями координаты и импульса соответственно, и результат Гейзенберга выражается следующим образом: *произведение неопределенностей координаты и импульса частицы всегда остается больше некоторой величины порядка $\hbar$.*

Проиллюстрируем этот результат несколькими примерами. Гауссовый пакет волн (не нормированный на единицу)

$$\psi(x) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{2\xi^2} \right]$$

занимает область порядка ξ около точки x_0 . Волна

$$\varphi(p) = \frac{\xi}{\sqrt{\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} x_0 (p_0 - p) - \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\hbar^2} (p - p_0)^2 \right]$$

в пространстве импульсов, которая ему соответствует, занимает в пространстве импульсов область порядка $\hbar/\xi$ около точки p_0 . Уменьшая ξ , мы уменьшаем Δx , но при этом увеличиваем Δp , так что их произведение остается порядка $\hbar$.

В качестве другого примера рассмотрим «прямоугольный сигнал»

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ip_0 x/\hbar}, & \text{если } |x| < a, \\ 0 & \text{если } |x| > a, \end{cases}$$

который отличен от нуля в области шириной $2a$, окружающей точку $x = 0$. В этом случае имеем

$$\varphi(p) = \frac{\sqrt{2\hbar/\pi}}{p - p_0} \sin \frac{(p - p_0)a}{\hbar}.$$

Функция $|\varphi(p)|^2$ обнаруживает наличие резкого максимума в точке p_0 , окруженного с двух сторон последовательностями нулевых минимумов (при $p = p_0 + n\pi\hbar/a$), разделенных максимумами, величина которых убывает как $[1/(p - p_0)]^2$. Можно сказать, что волна $\varphi(p)$ сконцентрирована между первыми нулями $|\varphi(p)|^2$ по обе стороны центрального максимума, т. е. в области $\Delta p \approx 2\pi\hbar/a$. Величина Δp тем больше, чем меньше протяженность сигнала $\Delta x \approx 2a$, т. е.

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx 4\pi\hbar.$$

На рис. 17 представлены графики $|\psi(x)|^2$ как функции x и $|\varphi(p)|^2$ как функции p для двух волновых пакетов, которые мы рассмотрели.

Все рассуждения, касающиеся протяженности волны ψ в сравнении с протяженностью ее образа Фурье в соответствующем пространстве, без труда переносятся на трехмерный случай. Обозначим с помощью Δx , Δy , Δz неопределенности трех пространственных координат, а с помощью Δp_x , Δp_y , Δp_z — неопределенности составляющих импульса. Корреляции между статистическими распределениями $P(r) = |\Psi(r)|^2$ и $\Pi(p) = |\Phi(p)|^2$ проявляются в существовании соотношений неопределенности:

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\gtrsim \hbar, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\gtrsim \hbar, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\gtrsim \hbar. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

До настоящего времени мы представляли соотношения неопределенности как соотношения по порядку величины. Это неизбежно, пока не установлено точное определение величин Δx , Δp_x и т. д., измеряющих различные неопределенности. Установив подходящее определение этих величин, мы придем к более строгим заключениям. Но хотя они и имеют определенные преимущества, необходимо особенно подчеркнуть, что главный смысл и значение соотношений неопределенности уже прояв-

ляются в формулах, верных только по порядку величины. Ни при каких обстоятельствах мы не можем приписать квантовой частице одновременно строго определенной координаты и строго определенного импульса. Представлять частицу как объект,

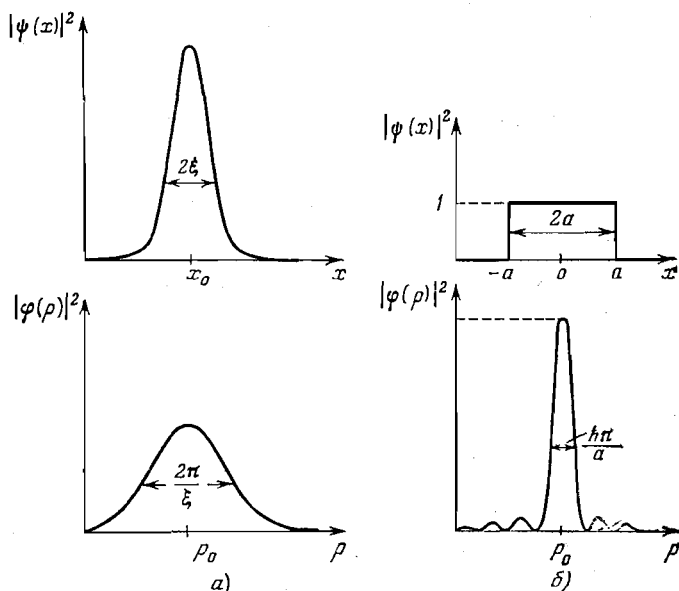


Рис. 17. Квадраты модулей волновых пакетов $\psi(x)$ и $\varphi(p)$ в случаях: а) гауссова волнового пакета; б) прямоугольного сигнала.

обладающий точно определенными положением и импульсом, можно только в случае, когда величина кванта действия $\hbar$ может считаться пренебрежимо малой, т. е. в области справедливости классической теории.

§ 8. Точное выражение соотношений неопределенности координата-импульс

Чтобы сократить изложение, мы рассмотрим детально только случай частицы в одном измерении. Примем следующее определение⁵⁾: Δx и Δp являются средними квадратичными откло-

⁵⁾ Это несомненно, наиболее удобное определение. В большинстве случаев определенные так величины Δx и Δp дают хорошее представление о неопределенностях в x и p . Однако иногда случается, что это математическое определение существенно отличается от оценок по порядку величины. Примером может служить разобранный выше случай «прямоугольного сигнала»: величина Δp по формуле (27) оказывается бесконечной, но мы видели, что грубая оценка дает $2\pi\hbar/a$.

нениями распределений $|\psi(x)|^2$ и $|\varphi(p)|^2$. Применяя обозначения § 5, имеем

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}. \quad (27)$$

Величина Δx , таким образом, непосредственно связана с измерением положения частицы: это статистическая флуктуация результата измерения около среднего значения $\langle x \rangle$; то же замечание относится к Δp , если иметь в виду измерение импульса. Мы покажем, что при самых общих предположениях

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2. \quad (28)$$

Рассмотрим положительно определенное выражение

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\psi + \lambda \hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx \quad (I(\lambda) \geq 0 \text{ при любом } \lambda).$$

Раскрывая это выражение и интегрируя по частям, последовательно получаем

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x\psi|^2 dx + \lambda \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi + x\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx + \\ &+ \lambda^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x^2 \psi dx - \lambda \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx - \lambda^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx, \end{aligned}$$

что дает, предполагая ψ нормированной на единицу и используя результаты § 5,

$$I(\lambda) = \langle x^2 \rangle - \lambda \hbar + \lambda^2 \langle p^2 \rangle. \quad (29)$$

Ввиду того, что полином второго порядка $I(\lambda)$ является положительно определенным (или равным нулю), его дискриминант $\hbar^2 - 4\langle p^2 \rangle \langle x^2 \rangle$ отрицателен (или равен нулю), следовательно

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \hbar^2/4. \quad (30)$$

Условие (30) менее ограничительно, чем объявленное выше условие (28). Но можно провести аналогичное вычисление, исходя из слегка отличного выражения для $I(\lambda)$, а именно, заменяя в формуле для $I(\lambda)$ величину x на $x - \langle x \rangle$ и $\hbar(\partial/\partial x)$ на $\hbar(\partial/\partial x) - i\langle p \rangle$ или, что то же самое, заменяя $\psi(x)$ на $e^{-i\langle p \rangle \frac{x}{\hbar}} \psi(x + \langle x \rangle)$. Результат аналогичен уравнению (29):

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 - \lambda \hbar + \lambda^2 (\Delta p)^2 \geq 0.$$

Условие (28) выражает тот факт, что дискриминант этого многочлена второго порядка по λ не может быть положительным.

Предшествующее доказательство применимо также и к случаю частицы в трехмерном пространстве. Волновая функция $\Psi(\mathbf{r})$ есть функция трех координат частицы в этом пространстве и интегралы, встречающиеся по ходу доказательства, суть интегралы по трехмерному пространству конфигураций; читатель легко проверит, что все манипуляции с этими интегралами остаются в силе. Само определение (27) средних квадратичных отклонений обобщается без труда. Таким образом, получаются соотношения неопределенности Гейзенберга

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq \hbar/2, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq \hbar/2, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq \hbar/2. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

§ 9. Обобщение: соотношения неопределенности для сопряженных переменных

В общем случае квантовых систем в R -мерных пространствах имеют место аналогичные соотношения неопределенности. Используя обозначения § 6 и по аналогии с определением (27), будем характеризовать неопределенности q_i и p_i квадратичными отклонениями, соответствующими их статистическим распределениям:

$$\Delta q_i = \sqrt{\langle q_i^2 \rangle - \langle q_i \rangle^2}, \quad \Delta p_i = \sqrt{\langle p_i^2 \rangle - \langle p_i \rangle^2}.$$

Рассуждения предшествующего параграфа могут быть повторены без изменений, и в результате мы получим соотношения неопределенности между сопряженными (декартовыми) переменными:

$$\Delta q_i \cdot \Delta p_i \geq \hbar/2 \quad (i = 1, 2, \dots, R). \quad (32)$$

§ 10. Соотношение неопределенности время-энергия

Существование соотношений неопределенности координата-импульс связано с тем, что импульс с точностью до постоянного множителя определяется как характеристическое волновое число плоской волны, а плоская волна, строго говоря, заполняет все пространство; попытка локализовать импульс частицы в некоторой определенной точке пространства столь же безуспешна, как попытка локализовать плоскую волну.

Но подобно тому, как импульс, будучи пропорционален волновому числу, не может быть локализован в пространстве, так и энергия, пропорциональная частоте, не может быть локализована во времени. Поэтому в соответствии с требованиями принципа относительности существует соотношение неопределенности

время-энергия, аналогичное соотношениям неопределенности координата-импульс, а именно

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar. \quad (33)$$

Однако физическая интерпретация этого соотношения иная. В соотношениях неопределенности координата-импульс переменные положения и импульса входят симметричным образом: как те, так и другие могут быть подвергнуты измерению в данный момент времени t . Статистические распределения результатов измерения, а следовательно, и неопределенности Δq_i , Δp_i определяются значением волновой функции системы в данный момент времени. В противоположность этому энергия и время в соотношении (33) играют совершенно разные роли: энергия E есть динамическая переменная системы, а время t есть параметр. Соотношение (33) связывает неопределенность ΔE значения, принимаемого этой динамической переменной с интервалом времени Δt , характеристическим для временной эволюции системы.

Начнем обсуждение этого вопроса с исследования поведения свободной частицы. Плоская монохроматическая волна $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ представляет частицу со строго заданным импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и энергией $\hbar\omega$. С помощью суперпозиции волн можно получить волновой пакет типа, представленного в уравнении (II.11). Для упрощения рассуждений рассмотрим волновой пакет в одном измерении и вообразим себе некоторый цуг волн, подобный прямоугольному сигналу, изображенному на рис. 17. Пусть Δx обозначает его длину, а v — групповую скорость. Пакет перемещается со скоростью v вдоль оси x , однако момент прохождения таким пакетом заданной точки на оси x не может быть указан точно: неопределенность в определении этого момента оказывается порядка $\Delta t \approx \Delta x/v$. Кроме того, мы видели, что указанный волновой пакет характеризуется также размазанностью в пространстве импульсов, отчего возникает неопределенность ΔE в значении энергии частицы

$$\Delta E \approx \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p = v \cdot \Delta p.$$

Из этих двух приближенных равенств находим, что

$$\Delta t \cdot \Delta E \approx \Delta x \cdot \Delta p$$

и, применяя соотношение неопределенности координата-импульс, получаем неравенство (33), которое ограничивает снизу величину произведения ширины энергетического спектра частицы ΔE и неточности Δt измерения момента прохождения частицей некоторой точки на оси.

Подобный подход легко распространяется на случай волнового пакета в медленно меняющемся поле, но оказывается несостоятельным в более общих случаях. Чтобы получить соотношение типа (33), надо, вообще говоря, учитывать временную зависимость волновой функции.

Наиболее простым является случай системы, обладающей вполне определенным значением энергии. Мы знаем (см. гл. II, § 16), что волновая функция квантовой системы с заданной энергией $E = \hbar\omega$ имеет характерную зависимость от времени $e^{-i\omega t}$. Рассмотрим в качестве примера частицу, помещенную в некоторое силовое поле. Если квантовое состояние характеризуется определенным значением энергии $E = \hbar\omega$, то волновая функция запишется в виде $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$. Отсюда следует, что распределение положений этой частицы $P(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ не зависит от времени. Легко видеть, что распределение по импульсам также обладает этим свойством. Следовательно, результат измерения положения или импульса не зависит от момента времени, когда производится измерение. Коротко это выражают, говоря, что физические свойства системы не зависят от времени или, что система находится в *стационарном состоянии*.

Предположим теперь, что квантовое состояние частицы есть суперпозиция двух стационарных состояний с энергиями E_1 и E_2 . Волновая функция имеет вид

$$\psi_1(\mathbf{r})e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(\mathbf{r})e^{-iE_2 t/\hbar},$$

а распределение

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} \psi_1^* \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar}$$

осциллирует между двумя крайними значениями $(|\psi_1| - |\psi_2|)^2$ и $(|\psi_1| + |\psi_2|)^2$ с периодом $\tau = \frac{h}{|E_1 - E_2|}$. Распределение по импульсам имеет то же свойство.

Таким образом, время τ является характеристическим для эволюции физических свойств системы. Результаты измерений, точнее статистическое распределение результатов измерений, проведенных в два различных момента времени t_1 и t_2 , будут практически одинаковыми, если разность $\Delta t = |t_1 - t_2|$ мала по сравнению с τ . Иными словами, чтобы свойства системы заметно изменились за интервал времени Δt , необходимо, чтобы произведение Δt и неопределенности в значении энергии $\Delta E = |E_1 - E_2|$ было по крайней мере равно величине порядка $\hbar$: $\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar$. Выраженный в такой форме этот результат остается справедливым, когда состояние системы есть произвольная суперпозиция произвольного числа стационарных состояний.

Следовательно, он имеет общее значение. Строгое доказательство будет дано позднее (§ VIII. 13).

Важным приложением соотношения (33) является соотношение *среднее время жизни — ширина* для радиоактивных и возбужденных систем (радиоактивные ядра, возбужденные состояния атомов, нестабильные элементарные частицы и т. д.). Такие системы не являются стационарными и не обладают определенным значением энергии; они характеризуются спектром энергий с некоторой шириной ΔE . Среднее время жизни играет здесь роль характеристического интервала времени, рассмотренного выше. Чтобы заметить существенные изменения физических свойств системы, необходимо ждать указанный промежуток времени. Поэтому

$$\tau \cdot \Delta E \approx \hbar.$$

Другое следствие неравенства (33) относится к измерению энергии как таковому. Точность ΔE измерения энергии связана со временем Δt , необходимым для измерения, соотношением (33). Так, можно измерять, например, энергию возбуждения первого возбужденного уровня атома водорода, бомбардируя атомы водорода пучком моноэнергетических электронов и измеряя энергию, теряемую электронами при соответствующих неупругих столкновениях. Время измерения здесь по крайней мере равно времени столкновения, т. е. времени Δt прохождения пакета волн, представляющего электрон, через область нахождения атома водорода; ошибка измерения по крайней мере равна неопределенности ΔE в энергии электронов падающего пучка; легко видеть, что $\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar$.

§ 11. Соотношения неопределенности для фотонов

Соотношения неопределенности для систем материальных частиц следуют из двойственности физических проявлений этих частиц как волн и как корпускул. По той же причине соотношения неопределенности должны иметь место для фотонов. Однако при выводе этих последних соотношений следует учитывать, что число фотонов, содержащихся в физической системе, обычно не является хорошо определенной величиной и, строго говоря, эволюцию фотона во времени можно рассматривать только, если он свободен от всяких взаимодействий.

При этих ограничениях можно представлять свободный фотон как волновой пакет, составленный из плоских монохроматических волн, распространяющихся со скоростью света ⁶⁾.

⁶⁾ Чтобы упростить изложение, мы пренебрегаем явлением поляризации света. Для учета его следует приписать фотону внутреннюю степень свободы.

Освещая экран, снабженный диафрагмой, способной открываться на время Δt , можно получить проходящий световой сигнал, который в предельном случае будет содержать только один квант света. Этот фотон может быть представлен волновым пакетом, ширина которого в направлениях трех осей координат ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$) будет зависеть от размеров диафрагмы и промежутка времени Δt . Такой волновой пакет является некоторой суперпозицией монохроматических волн и имеет все свойства пакетов, рассмотренных выше. Составляющие импульса и энергия пакета отличны от нуля в некоторых конечных областях с размерами $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ и ΔE . Все эти величины удовлетворяют соотношениям:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim \hbar, \quad \Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar.$$

Эти неравенства позволяют сделать некоторые выводы относительно механизма взаимодействия фотона с веществом. Например, в процессе поглощения фотона атомом (фотоэлектрический эффект) произведение неопределенности ΔE величины энергии, передаваемой атому, и неопределенности Δt момента передачи этой энергии по порядку величины в лучшем случае равно $\hbar$. Если же атом, находящийся в возбужденном состоянии, испускает фотон, то момент перехода характеризуется неопределенностью, равной примерно среднему времени жизни этого возбужденного состояния. Фотон представляется волновым пакетом пространственной протяженности ct и, следовательно, дисперсия энергии ΔE должна быть такова, что $\tau \cdot \Delta E \approx \hbar$. Этот результат хорошо подтверждается на опыте. Его можно было бы получить, исходя из соотношения неопределенности среднее время жизни-ширина, обсуждавшегося выше, и заметив, что, согласно закону сохранения энергии дисперсия энергии испущенного фотона (конечное состояние) должна быть равна дисперсии энергии возбужденного атома (начальное состояние).

Раздел III. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ И МЕХАНИЗМ ИЗМЕРЕНИЯ

§ 12. Неконтролируемое возмущение в процессе измерения

Ниже мы сосредоточим внимание на соотношениях неопределенности типа координата-импульс. Отклонения $\Delta x, \Delta p$, входящие в эти соотношения, относятся к измерениям, осуществленным при выполнении условий, которые были указаны выше при определении квантовых вероятностей. Их не следует смешивать с обычными ошибками измерений, источником которых является несовершенство самого измерительного устройства, не позволяющее фиксировать измеряемые величины с идеальной

точностью. Во всех предшествующих рассуждениях мы пренебрегали ошибками этого рода.

Рассмотрим тщательней, что представляет собой сама операция измерения, если принять сформулированную выше статистическую интерпретацию. Пусть мы имеем дело, например, с измерением координат, определяющих положение частицы квантовой системы, динамическое состояние которой представляется волновой функцией Ψ (в дальнейшем для краткости мы будем говорить, что система находится в состоянии Ψ). Допустим, что мы обладаем *идеально точным* измерительным прибором. Невозможность точно предсказать показания этого прибора не связана с его несовершенством. Дело в том, что состояние Ψ в общем случае не соответствует какому-либо точному значению x ; это суперпозиция динамических состояний, каждое из которых соответствует своему значению x . Непосредственно после того как измерение выполнено, мы можем утверждать, что система находится в динамическом состоянии, в котором координата x имеет точное значение x' , указанное прибором. Но такое состояние, очевидно, уже не может быть представлено волновой функцией Ψ , следовательно, *вмешательство измерительного прибора изменило динамическое состояние измеряемой системы. Более того, возмущение системы в процессе измерения оказывается в известной мере неконтролируемым.* Это надо понимать в том смысле, что мы не можем точно предсказать, каким же будет состояние системы после измерения — мы знаем только вероятности того, что система находится в некоторых динамических состояниях, соответствующих тем или иным значениям x' координаты x .

В том, что измеряемая система в процессе измерения испытывает некоторое возмущение, нет ничего удивительного. Ведь сам процесс измерения предполагает взаимодействие системы с измерительным прибором, при котором последний претерпевает некоторое изменение своего состояния. Это изменение состояния прибора играет решающую роль, так как именно оно выражает реакцию прибора, позволяющую зафиксировать определенное значение измеряемой величины. Естественно, что и измеряемая система в процессе измерения изменит свое состояние.

В случае макроскопических явлений всегда можно добиться, чтобы возмущающее действие измерительного прибора на систему было пренебрежимо мало или могло быть учтено с достаточной степенью точности. Поясним это на примере. Можно установить положение макроскопического объекта, фиксируя его образ на фотографической пластинке с помощью какой-либо оптической системы; динамическое состояние объекта в процессе такого измерения неизбежно изменяется, так как он под-

вергается воздействию света (давление излучения). В классическом приближении, когда падающий свет можно рассматривать как непрерывную волну (большое число присутствующих фотонов), изменение состояния объекта может быть в принципе точно вычислено. При условии, что мы располагаем достаточно чувствительной пластинкой, можно уменьшить освещенность объекта настолько, что возмущающее действие световой волны станет пренебрежимо малым.

Эти рассуждения, очевидно, справедливы только в рамках классического приближения. На самом деле действие измерительного инструмента на объект не может быть сделано сколь угодно малым, так как их взаимодействие осуществляется дискретными квантами. Угол отклонения кванта света объектом точно не определен, другими словами, передача импульса в процессе столкновения кванта с объектом должна рассматриваться как неконтролируемая величина. Таким образом, измерение положения в пространстве сопровождается неконтролируемым изменением импульса объекта (полуколичественный анализ этого эффекта будет дан в следующем параграфе). Поскольку в макроскопических масштабах все изменения величин такого рода пренебрежимо малы, классическая теория без обсуждения принимает, что все динамические переменные физической системы могут быть одновременно измерены с произвольно малой ошибкой, и определяет динамическое состояние системы в любой момент точным заданием всех этих переменных в этот момент времени. На микроскопическом уровне этот постулат не имеет более экспериментального обоснования и должен быть отброшен. *Квантовая теория принимает, что непредсказуемое и неконтролируемое возмущение, испытываемое физической системой в процессе измерения, всегда конечно и таково, что выполняются соотношения неопределенности Гейзенберга.* Например, при измерении координаты x , как мы видели выше, система переходит из состояния Ψ в состояние Ψ' . Уже было сказано, что состояние Ψ в общем случае не соответствует ни точному значению x , ни точному значению p , а дает лишь распределение вероятности $P(x)$ найти то или иное значение x , если мы осуществим точное измерение этой величины, и распределение вероятности $\Pi(p)$ найти то или иное значение p , если мы осуществим точное измерение p . Новое состояние Ψ' соответствует новым распределениям $P'(x)$ и $\Pi'(p)$, при этом отклонения $\Delta'x$, $\Delta'p$ в этих распределениях обязательно удовлетворяют соотношению $\Delta'x \cdot \Delta'p \geq \hbar/2$. Если, в частности, измерение x идеально точно ($\Delta'x = 0$), то величина $\Delta'p$ должна быть бесконечно большой. Этот результат часто выражают словами, что нельзя уменьшить неопределенность в переменной положения

x , не увеличивая соответствующим образом неопределенность в переменной импульса p , и наоборот.

Рассмотрим несколько примеров возможных измерений и покажем, что возмущение, испытываемое измеряемой системой, всегда именно таково, что выполняются соотношения неопределенности Гейзенберга⁷⁾.

§ 13. Измерения положения в пространстве

а) *Использование диафрагмы.* Рассмотрим параллельный пучок моноэнергетических электронов. Ставится задача определить положение электронов вдоль оси Ox , перпендикулярной направлению Oz пучка электронов. С этой целью на пути пучка ставится экран с отверстием (рис. 18). Если d есть ширина отверстия, то положение электрона, проходящего диафрагму,

определяется с точностью $\Delta x = d$. Однако этот электрон представляется волной де Бройля с длиной $\lambda = h/p$; прохождение диафрагмы сопровождается явлением дифракции, так что пучок «раскрывается» на угол α порядка

$$\sin \alpha \approx \lambda/d = h/p \cdot \Delta x.$$

Отсюда следует, что возникает составляющая $\Delta p_x = p \sin \alpha$ вдоль оси x и выполняется соотношение $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$.

Импульс электрона p_x вдоль оси x , по предположению точно

известный до операции измерения ($p_x = 0$), неконтролируемо изменяется на величину порядка $h/\Delta x$ в процессе измерения (т. е. при прохождении диафрагмы).

Важно убедиться здесь, что импульс, передаваемый электроном диафрагме в процессе измерения, не может быть определен

⁷⁾ Именно это имеет место во всех экспериментальных устройствах, позволяющих обнаружить «траекторию» частицы, например, в фотографических пластинках или камерах Вильсона для наблюдения заряженных частиц. Так, в камере Вильсона частица ионизирует на своем пути некоторое число атомов, и возникающие ионы служат центрами конденсации, вокруг которых образуются видимые капельки. Положение частицы определяется с неопределенностью Δq , по крайней мере равной радиусу ионизованного атома (практически она значительно больше). Но в процессе взаимодействия с измерительным устройством, т. е. в процессе ионизации атома, частица испытывает непредсказуемую и неконтролируемую передачу импульса Δp порядка $h/\Delta q$. Поэтому «траектория» частицы может наблюдаться только с точностью $\Delta q \cdot \Delta p \approx h$.

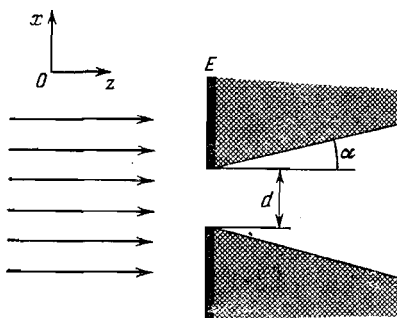


Рис. 18. Измерение положения с помощью диафрагмы.

с точностью, превышающей $\hbar/\Delta x$, иначе наши рассуждения не будут справедливы. Чтобы осуществить операцию измерения положения, диафрагма должна оставаться неподвижной, и ее положение (вдоль Ox) должно быть известно с точностью до δx , причем δx должно быть значительно меньше ширины отверстия: $\delta x \ll \Delta x$. Однако диафрагма, подобно электрону, также является квантовым объектом, ее импульс не может быть определен с точностью, превышающей δp , так что мы имеем

$$\delta p \approx \hbar/\delta x \gg \hbar/\Delta x.$$

Диафрагма может практически оставаться неподвижной в процессе измерения, если она достаточно тяжела; это ограничение не мешает самой операции измерения. Однако невозможно определить изменение импульса диафрагмы с точностью, превосходящей δp и, следовательно, $\hbar/\Delta x$.

Это рассуждение проясняет еще одно важное обстоятельство. Необходимо принять, что *измерительный прибор сам является квантовым объектом и тоже удовлетворяет соотношениям неопределенности*. Это предполагает, что *соотношения неопределенности имеют универсальный характер*. В противном случае физическая интерпретация квантовой теории должна была бы быть подвергнута глубокой ревизии.

б) Использование микроскопа.

Применение диафрагмы является, конечно, наиболее простым способом измерения положения объекта. Другой, менее прямой, но столь же успешный метод состоит в освещении объекта и наблюдении его изображения в микроскоп. Рассмотрим поэтому определение положения x электрона при наблюдении в микроскоп (рис. 19). Точность измерения ограничивается тем, что изображение каждой точки есть на самом деле дифракционное пятно конечных размеров. Если при оценке точности измерения Δx исходить из размеров этого пятна, то $\Delta x \approx \lambda/\sin \theta$, где λ есть длина волны используемого света, а θ — половина угла раствора пучка, рассеянного электроном и сфокусированного в микроскопе. Однако рассеяние света происходит отдельными квантами и сопровождается частично неконтролируемой передачей импульса (эффект Комптона). Этот эффект минимален, когда рассеиваемый свет содержит только один фотон; импульс последнего имеет точно определенную величину $p = \hbar/\lambda$, но направление

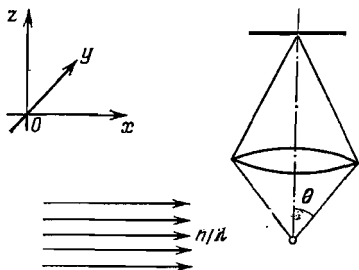


Рис. 19. Измерение положения с помощью микроскопа.

распространения определяется только с точностью до угла θ . Импульс, передаваемый электрону, характеризуется поэтому неопределенностью $\Delta p \approx h \sin \theta / \lambda$. Чем точнее измерение положения, тем больше этот эффект, и мы по-прежнему имеем $\Delta x \cdot \Delta p \approx h$.

Можно возразить, что точность измерения x определяется не размерами дифракционного пятна, а точностью измерения центра этого пятна. Эта точность тем более велика, чем больше число N фотонов, принимающих участие в образовании пятна. По законам математической статистики ошибка при вычислении x должна быть в $\sqrt{N}$ раз меньше, чем приведенная выше

$$\Delta x \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\lambda}{\sin \theta}.$$

Однако если передача импульса каждым фотоном характеризуется неопределенностью $(h \sin \theta / \lambda)$, то неопределенность в импульсе, передаваемом N фотонами, будет в $\sqrt{N}$ раз больше (сложение квадратичных ошибок), т. е.

$$\Delta p \approx \sqrt{N} \frac{h}{\lambda} \sin \theta.$$

Следовательно,

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h.$$

§ 14. Измерения импульса

Аналогичным образом импульс частицы может *a priori* быть измерен с любой наперед заданной точностью, но операция измерения всегда сопровождается возмущением, которое увеличивает неопределенность в знании координаты, измеряющей положение, так что соотношения неопределенности всегда выполнены. Покажем это на двух примерах.

а) *Отклонение в магнитном поле.* Импульс заряженной частицы обычно измеряется по отклонению в постоянном магнитном поле. Количество движения p связано с радиусом кривизны R траектории частицы хорошо известным соотношением

$$p = \frac{e}{c} \mathcal{H} R,$$

где $\mathcal{H}$ — величина магнитного поля, а e — заряд частицы.

Исследуем процесс измерения импульса электрона этим методом. На рис. 20 представлена схема эксперимента. Электрон попадает в поле магнита через диафрагму A и покидает его через диафрагму B после отклонения на 180° (этот угол отклонения выбран для удобства рассуждений). В момент, непосредственно предшествующий началу измерения (т. е. непосред-

ственно перед прохождением диафрагмы), направление движения (ось Oy) и координата электрона в этом направлении ($\Delta y = 0$) по предположению точно известны. Эти начальные условия $p_x = p_z = 0$, $y = y_A$ в принципе всегда могут быть реализованы с помощью коллиматора, снабженного обтюратором с достаточно коротким «временем пропускания». Радиус кривизны равен половине расстояния между двумя диафрагмами: если $2d$ и $2d'$ — соответствующие ширины этих диафрагм, то R измеряется с точностью до $d + d'$. Таким образом, импульс электрона известен с точностью до

$$\Delta p = \frac{e}{c} \mathcal{H} (d + d') = \frac{p}{R} (d + d').$$

Измеряемой в опыте величиной является составляющая импульса в направлении оси Oy . Покажем, что в результате измерения координата электрона y будет характеризоваться неопределенностью Δy , причем $\Delta y \cdot \Delta p \geq \hbar$. Квантовым эффектом, существенным в этом опыте, является дифракция электронной волны при прохождении диафрагмы A (читатель без труда убедится в том, что дифракция на диафрагме B роли не играет). Если бы указанного эффекта не было, то импульс электрона на входе в область действия поля был бы строго направлен по Oy , далее электрон описывал бы полукруг, и время движения от A к B , равное $\pi mc / e\mathcal{H}$, не зависело бы от величины p . Квантовый эффект дифракции приводит к тому, что угол между направлением импульса на входе и осью Oy характеризуется неопределенностью $\alpha \approx \lambda/d = h/pd$; траектория электрона (в приближении геометрической оптики) есть дуга окружности, определяемая с точностью до 2α ; момент прихода в B характеризуется неопределенностью $\Delta t = 2\alpha mc / e\mathcal{H}$, а неопределенность Δy в p/m раз больше, следовательно

$$\Delta y \approx 2\alpha \frac{pc}{e\mathcal{H}} \approx 2h \frac{c}{e\mathcal{H}d}.$$

Отсюда получаем

$$\Delta y \cdot \Delta p \approx 2h \left(1 + \frac{d'}{d}\right).$$

б) Столкновение с фотоном. Следующий метод измерения импульса основан на изучении процесса столкновения рассмат-

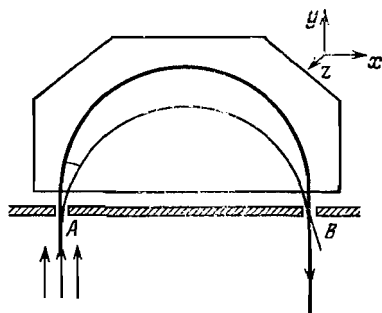


Рис. 20. Измерение импульса методом отклонения в магнитном поле.

ризаемой частицы с другой частицей, например, с фотоном, начальный импульс которого известен точно; измеряется импульс, передаваемый при столкновении второй частице. Рассмотрим электрон из предшествующей задачи с начальными данными $p_x = p_z = 0$, $y = y_A$. Для определения импульса электрона p_y будем облучать его идеально монохроматическим светом частоты ν , распространяющимся параллельно оси y . Один из световых фотонов испытывает комптоновское столкновение и измеряется его конечный импульс. Чтобы упростить рассуждения, предположим, что конечный импульс фотона также параллелен оси y , но направлен в противоположную сторону (рис. 21). Пусть ν' — частота фотона после столкновения; теория комптоновского рассеяния позво-

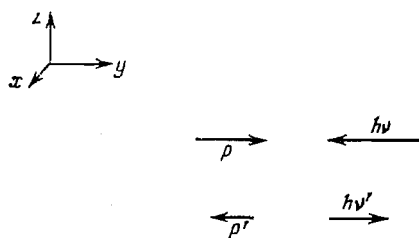


Рис. 21. Измерение импульса электрона при комптоновском столкновении с фотоном. Схема столкновения

ляет выразить начальный p и конечный p' импульсы электрона через частоты ν и ν' . Предположим, что реализуются условия нерелятивистского приближения ($p, p' \ll mc$ и $\nu, \nu' \ll mc^2/h$). В результате вычислений находим

$$p = mc \frac{\nu' - \nu}{\nu' + \nu} + \frac{h}{2c} (\nu' + \nu), \quad p' = mc \frac{\nu' - \nu}{\nu' + \nu} - \frac{h}{2c} (\nu' + \nu),$$

причем точность определения этих величин связана с точностью определения ν' соотношением

$$\Delta p \approx \Delta p' \approx mc \frac{\Delta \nu'}{\nu' + \nu}.$$

Положение y электрона после измерения может быть вычислено, исходя из того, что в начальный момент $y = y_A$, скорость электрона до столкновения равна p/m , а после столкновения p'/m . Если положение и импульс рассеянного фотона можно было бы измерить одновременно с большой точностью, то был бы строго определен и момент столкновения, а тогда неопределенности в значениях p и y могли бы быть сделаны одновременно сколь угодно малыми. Читатель проверит это без труда. Однако измерение ν' есть измерение частоты; чем точнее это измерение, тем больше неопределенность в определении момента прохождения фотоном какой-либо точки, в частности в определении момента столкновения: $\Delta \nu' \cdot \Delta t \geq 1$. В то же время неопределенность Δy в положении электрона после столкновения равна по меньшей мере произведению Δt

на изменение скорости, т. е.

$$\Delta y \gtrsim \frac{|p - p'|}{m \Delta v'} = \frac{h}{mc} \frac{v + v'}{\Delta v'},$$

что дает $\Delta y \cdot \Delta p$ и $\Delta y \cdot \Delta p' \gtrsim h$.

В этой измерительной операции, как и в предшествующей, измеряемая величина p_y сама меняется в процессе измерения. *Это изменение не следует смешивать с непредсказуемым и неконтролируемым возмущением, испытываемым системой при измерении.* Действительно, указанное изменение известно точно, во всяком случае значения p и p' величины p_y до и после столкновения известны с одинаковой точностью, которая может быть сделана сколь угодно большой. Напротив, ввиду невозможности предсказать и контролировать возмущение, испытываемое частицей при осуществлении измерения (неопределенность в определении момента передачи импульса и энергии), величина y после столкновения известна только с неопределенностью Δy , причем эта неопределенность тем больше, чем точнее измерение p .

Подчеркнем еще раз универсальность характера соотношений неопределенности. Действительно, что бы произошло, если величина кванта действия для фотонов была бы равна некоторой величине $\hbar'$, значительно меньшей $\hbar$? Все наши рассуждения относительно измерения типа б) можно было бы повторить, заменяя всюду $\hbar$ на $\hbar'$; это привело бы нас к соотношению $\Delta y \cdot \Delta p' \approx \hbar' \ll \hbar$. Соотношения неопределенности оказались бы нарушенными и вся развиваемая нами статистическая интерпретация теории пришла бы в противоречие с опытом.

Оба метода измерения импульса, обсуждавшиеся выше, требуют некоторого временного интервала. Этот интервал может быть вообще говоря уменьшен (при увеличении поля $\mathcal{H}$ в первом случае, при увеличении частоты ν во втором; см. задачу 7) без изменения точности измерения p_y . Но как бы то ни было, вероятности, определенные в §§ 2, 5, вычисляются с помощью волновой функции, заданной в момент времени t . Поскольку само измерение не мгновенно, следует точно определить этот момент времени: *t есть момент начала измерения*, так что распределение вероятностей, данное в § 2 (уравнение (6)) относится к импульсу p_y , т. е. к импульсу до измерения.

Раздел IV. ОПИСАНИЕ ЯВЛЕНИЙ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТЬ И ПРИЧИННОСТЬ

§ 15. Проблемы статистической интерпретации

Несомненно, что представление состояния квантовой системы волновой функцией имеет абстрактный характер, а статистическая интерпретация теории с трудом поддается интуитивному

восприятию. Однако попытки описания микроскопических явлений на основе более конкретных и интуитивно ясных моделей неизбежно сталкиваются с рядом противоречий.

Рассмотрим, например, атом гелия. Чтобы не усложнять картины, допустим, что ядро атома неподвижно и масса его бесконечно велика. Это значит, что мы трактуем атом как систему, состоящую из двух электронов с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$. Проще всего представить себе две корпускулы (два электрона), движущиеся более или менее сложным образом вокруг массивного ядра. Однако при этом подразумевается, что каждый электрон следует вполне определенной траектории, в то время как волновая функция Ψ позволяет нам найти только статистическое распределение координат при измерении положения и статистическое распределение составляющих импульса при измерении импульса. Поскольку мы допустили, что динамическое состояние атома полностью определяется волновой функцией Ψ , неизбежен вывод, что корпускулярная модель атома частично неверна. Можно, наоборот, мыслить себе два электрона как непрерывное распределение электричества в пространстве, окружающем ядро, или, лучше, как непрерывную волну, «заряженную» электричеством. Но эта картина также не свободна от трудностей. Во-первых, волна Ψ определена в конфигурационном, а не в обычном трехмерном пространстве, поэтому она не может быть отождествлена с той конкретной волной, о которой мы говорим. Точное определение этой последней есть задача, до сих пор не получившая своего решения. Во-вторых, образ непрерывной волны не может быть согласован с некоторыми явлениями, такими как ионизация атома, где проявляется существование отдельных и в какой-то мере локализованных корпускул.

Разумеется ничто не доказывает, что согласованное и вполне предметное представление микроскопических явлений не может быть сформулировано. Тем не менее, до сих пор никому не удалось этого сделать. Впрочем, следует отдавать себе отчет в том, что с точки зрения логики более или менее абстрактные концепции физической теории вовсе не обязаны выражаться на конкретном языке. Вся наша интуиция, все наше чувство конкретного основываются на каждодневном опыте, и понятия и образы, используемые для конкретного описания явления, каким бы оно ни было, также взяты из этого опыта. Нет никаких оснований думать, что язык таких понятий может быть без противоречий использован для описания явлений микроскопической физики, столь удаленных от повседневного опыта. Эти явления дают только один пример подобных трудностей. Аналогичным образом некоторые результаты теории относительности также

противоречат нашей интуиции⁸⁾, таковы, например, явления сокращения длин и растяжения времени, когда относительная скорость двух систем отсчета близка к скорости света c . Не удивительно поэтому, что конкретные образы микроскопических явлений при их последовательном развитии приводят к противоречиям и парадоксам.

Полезно в этой связи отметить аналогию между ролью постоянной Планка h в квантовой теории и ролью постоянной c в теории относительности. Тот факт, что скорость света c конечна, приводит к пересмотру понятия одновременности и ограничивает поэтому область применимости механики Ньютона. Аналогично тот факт, что постоянная h конечна (а не равна нулю), приводит к пересмотру понятия одновременных измерений и ограничивает область применимости классической теории. Конкретные образы из нашего повседневного опыта относятся к миру, где c кажется бесконечной, а h кажется равной нулю, поэтому они не могут быть перенесены как таковые в область, где то или иное из этих приближений теряет силу.

Таким образом, отсутствие в квантовой теории наглядного представления явлений ни в коей мере не может рассматриваться как недостаток теории. Однако квантовая теория может быть подвергнута критике с других позиций.

Вопрос в том, отвечает ли описание явлений в квантовой теории тем требованиям, которые мы вправе предъявить ко вполне удовлетворительной теории? Первое требование к теории, конечно, состоит в том, чтобы ее предсказания согласовывались с экспериментальными наблюдениями; совершенно очевидно, что квантовая теория удовлетворяет этому требованию, во всяком случае в области атомной и молекулярной физики. Но физическая теория не может претендовать на *полноту*, если она ограничивается только предсказаниями результатов того или иного эксперимента. В начале всякой научной теории лежит фундаментальный постулат, что природа обладает объективной реальностью, не зависящей от наших чувственных восприятий или методов исследования; целью всякой физической теории является адекватное отражение этой объективной реальности.

Однако все выводы квантовой теории всегда выражаются в форме: «выполняя то или иное наблюдение, мы получим тот или иной результат». Законно поставить вопрос, дает ли квантовая теория полное описание объективной реальности?

⁸⁾ Примеры противоречий между человеческой интуицией и открытиями физики гораздо старше теории относительности (вспомним галилеевское «а все-таки она вертится» и т. д.).

Вопрос этот тем более обоснован, что предсказания теории имеют статистическую природу. В классической теории к статистическим методам прибегают в тех случаях, когда информация, которой мы обладаем относительно изучаемых систем, является неполной. Концепции классической статистической теории не позволяют дать полное описание объективной реальности, они позволяют только получить некоторые средние величины и некоторые результаты, касающиеся исследуемых физических систем, несмотря на недостаток сведений относительно этих систем. Эти результаты, строго говоря, неприменимы к отдельной системе, они относятся к ансамблю из очень большого числа N одинаковых и независимых систем. Аналогичным образом квантовая теория в общем случае не дает с достоверностью результат того или иного измерения в отдельной системе, она дает статистическое распределение результатов, получаемых при повторении того же самого измерения на совокупности очень большого числа N систем, представляемых одной волновой функцией.

Напрашивается вывод, что квантовая теория дает корректное описание статистических ансамблей систем из микроскопических объектов, но не может претендовать на полное описание каждой системы, взятой в отдельности. Согласно этой точки зрения, знания волновой функции недостаточно для полного описания динамического состояния отдельной физической системы. Для этого потребовалось бы некоторое число дополнительных данных, которые мы не можем получить ввиду несовершенства наших средств наблюдения. Другими словами, динамическое состояние физической системы должно определяться в каждый момент времени некоторым числом *скрытых параметров*, эволюция которых во времени определяется строгими законами. Невозможность предсказать с достоверностью результаты данного измерения обусловлена невозможностью узнать точные значения этих скрытых параметров. Волновая функция, следовательно, не представляет объективное состояние изучаемой системы, это скорее математический объект, содержащий всю ту неполную информацию, которую мы имеем относительно системы.

Хотя это мнение вполне можно защищать, в настоящее время наибольшее распространение имеет точка зрения, согласно которой квантовая теория дает полное описание явлений природы (см. сноску на стр. 57). При этом основываются на анализе, которым мы обязаны Бору (1927), особых условий выполнения наблюдений в микромире, а также на общем принципе, вытекающем из этого анализа, — принципе дополнительности.

§ 16. Описание микроскопических явлений и дополнительность

Всякое описание природных явлений — при полном признании их объективной реальности — неизбежно на некотором этапе включает рассмотрение результатов наблюдений этих явлений. Между тем, и в этом состоит первое замечание Бора, как бы ни было далеко от классической механики изучаемое явление, для его описания мы вынуждены использовать классическую терминологию. Действительно, дать отчет о некотором опыте, значит описать недвусмысленно условия эксперимента и результаты наблюдений, указав, например, что «данная стрелка в такой-то момент времени остановилась у такого-то деления шкалы». Особенно важно отметить необходимость использования точного языка без каких-либо элементов неуверенности со стороны наблюдателя. Это совершенно необходимо, так как опыт должен быть воспроизводим, а его течение и результаты должны оставаться независимыми от наблюдателя.

Однако на микроскопическом уровне мы не можем провести строгого различия между природным явлением и инструментом, служащим для его наблюдения, различия, которое подразумевает обычное представление о наблюдении. Описывать объект и прибор как различные сущности можно только в том предельном случае, когда величину кванта действия h можно считать бесконечно малой. Это ограничивает возможности описания и анализа изучаемого явления на классическом языке. Любая попытка распространить анализ за эти границы требует модификации измерительной техники и самих условий эксперимента, а это вводит новые возможности взаимодействий между объектами и прибором.

Вследствие этого, результаты наблюдений, полученные в различных условиях опыта, не могут быть совмещены в единой картине явления. Они должны рассматриваться как дополняющие друг друга в том смысле, что только вся совокупность различных экспериментов исчерпывает возможность получения информации относительно свойств объектов микроскопической физики.

§ 17. Дополнительные переменные. Совместные переменные

Описание явлений микроскопической физики осуществляется на основе дополнительных элементов, т. е. элементов, дополняющих друг друга при составлении классической картины явления, но определяемых с помощью взаимоисключающих экспериментальных устройств.

Координата x и импульс p образуют пару дополнительных элементов в указанном выше смысле. Точные измерения x и p требуют использования несовместимых измерительных устройств, так что одновременное измерение этих двух величин не может быть осуществлено с точностью превышающей $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$. Это следует из изложенного в §§ 13 и 14 материала. Взаимоисключающий характер экспериментальных устройств, служащих для измерения x и p , особенно хорошо проявляется в случае измерений с диафрагмой (§ 13, а). Диафрагма, применявшаяся для измерения положения электрона, может быть использована и для измерения импульса: для этого достаточно определить импульс, передаваемый экрану при столкновении с электроном. Но поскольку ансамбль электрон + экран образует неделимую квантовую систему и нет возможности провести строгое различие между составляющими частями, нельзя использовать классический язык и говорить о независимой эволюции электрона (измеряемая система) и экрана (измерительный инструмент), не допуская, что их взаимодействие имеет неконтролируемый характер. Если мы хотим знать x с точностью Δx , то мы не в состоянии контролировать передачу импульса экрану с точностью, превышающей $\hbar/\Delta x$. Если же мы желаем измерить p с точностью Δp и снабжаем экран всеми необходимыми приспособлениями для точного измерения передаваемого импульса, то оказывается невозможным контролировать положение экрана с точностью, превышающей $\hbar/\Delta p$, что ограничивает наши сведения об x (см. задачу 10).

Говорят, что x и p образуют пару *дополнительных переменных*. Сам принцип дополнительности часто выражают в следующей, более строгой форме:

описание физических свойств микроскопических объектов на классическом языке требует использования пар дополнительных переменных, причем каждый член пары определяется тем точнее, чем менее точно определяется другой.

Эта формулировка подчеркивает главное отличие между квантовой и классической механикой, а именно, тот факт, что все динамические переменные квантовой системы не могут быть одновременно определены с идеальной точностью.

Мы скажем, что две динамические переменные являются *совместными*, если они могут быть одновременно точно определены. В гл. V мы увидим, что в самом общем случае две совместные переменные представляются коммутирующими линейными операторами. Так, координаты частицы x и y являются совместными переменными. Особенно важную роль играют *полные наборы совместных переменных* $a, b, c, \dots$; они составлены из попарно совместных переменных и обладают тем свойством, что любая другая переменная, совместная с каждой

переменной набора, является функцией этих переменных $f(a, b, c, \dots)$. Рассмотрим в качестве примера квантовую систему, состоящую из одной частицы. Три переменных положения x, y, z образуют полный набор совместных переменных. Действительно, все три эти переменные могут быть одновременно измерены. Далее, всякая динамическая переменная является некоторой функцией x, y, z и p_x, p_y, p_z , но совместными с x, y, z будут только те переменные, которые не зависят от p_x, p_y, p_z , так как каждая из этих последних величин несовместна с x, y, z соответственно. Таким образом, общий вид динамической переменной, совместной с x, y, z , есть $F(x, y, z)$. Переменные x, y, z образуют полный набор, то же самое можно сказать относительно переменных p_x, p_y, p_z (задание этих трех переменных полностью определяло динамическое состояние системы до измерения в примерах § 14). Точное измерение полного набора совместных переменных системы дает тот *максимум информации* о системе, который вообще можно получить. Это измерение полностью определяет динамическое состояние системы; ему соответствует определенная волновая функция. Мы вернемся к этому вопросу в гл. V (§ 15 и 16).

§ 18. Корпускулярно-волновой дуализм и дополнительность

Если исходить из принципа дополненности, то корпускулярно-волновая двойственность квантовых объектов перестает быть парадоксальной: волновой и корпускулярный аспекты оказываются дополнительными и проявляются во взаимоисключающих экспериментальных условиях. Всякая попытка выявить один из аспектов поведения требует соответствующего экспериментального устройства, которое лишает нас возможности наблюдать другой аспект поведения объекта.

Рассмотрим, например, дифракционный опыт Юнга. Монохроматическое излучение от источника S проходит через экран Y с двумя отверстиями, расстояние между которыми есть d , а затем образует на экране E , отстоящем от Y на расстоянии D , интерференционную картину (рис. 22). Расстояние между полосами равно $\lambda D/d$, где λ — длина волны излучения. В этом опыте

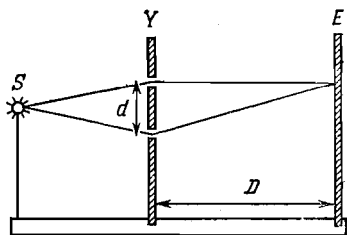


Рис. 22. Дополненность корпускулярного и волнового аспектов явления в опыте Юнга. S — источник, Y — экран Юнга, E — экран детектора. На рисунке S, Y и E зафиксированы на общей подставке. Экспериментальное устройство позволяет выявить интерференционную картину, но не позволяет получить какой-либо информации относительно траекторий каждого фотона.

источник S и экраны Y и E жестко укреплены на общем основании. Сами полосы можно наблюдать только, если положение (вдоль Ox) экрана Y по отношению к S и E фиксировано с точностью δx , причем $\delta x < \lambda D/d$ (ради простоты предполагаем, что источник S находится на бесконечности). Корпускулярный аспект излучения можно выявить в том случае, если известно, через какое отверстие экрана Y прошла частица. Для этого проще всего измерить импульс, переданный экрану Y при прохождении частицы; он будет отличаться на $\approx pd/D$ в зависимости от того, через какое отверстие прошла частица ($p = h/\lambda$ обозначает импульс частицы). Измерение должно быть выполнено с такой точностью, чтобы $\delta p < h d/\lambda D$. Но чтобы проявились одновременно оба аспекта поведения квантового объекта необходимо, чтобы оба неравенства удовлетворялись одновременно, т. е. $\delta x \cdot \delta p < h$, что невозможно, так как измерительное устройство само является квантовым объектом и удовлетворяет соотношениям неопределенности. Любая попытка выявить корпускулярный аспект поведения излучения приведет к смазыванию интерференционной картины (см. задачу 11).

§ 19. Дополнительность и причинность

Особые условия описания явлений в квантовой теории ограничивают область справедливости принципа причинности и объясняют, почему предсказания теории имеют статистический характер⁹⁾.

Принцип причинности в строгом смысле может применяться только по отношению к изолированным системам. Динамическое состояние такой системы в данный момент представляется ее волновой функцией в этот момент. Существует причинная (или каузальная) связь между волновой функцией $\psi(t_0)$ в данный момент t_0 и волновой функцией $\psi(t)$ в любой последующий момент, и связь эта выражается уравнением Шредингера. Однако если мы стремимся осуществить наблюдение над системой, то не можем пренебречь действием на систему инструмента наблюдения. Это действие, как мы знаем, в определенной мере непредсказуемо и неконтролируемо, ибо мы не можем строго разделить систему и инструмент. Они образуют единую квантовую систему, представляемую волновой функцией $\Psi(t)$, зависящей

⁹⁾ Принцип причинности здесь, конечно, понимается не в философско-методологическом смысле как принцип объективной закономерной взаимосвязи и взаимообусловленности явлений материального мира. Имеется в виду принцип классической однозначной детерминированности явлений (так называемый лапласовский детерминизм). Специфический характер законов движения микрообъектов ведет к расширению и углублению понятия причинности и проявлению статистических или вероятностных закономерностей. См. по этому поводу цитированную на стр. 57 книгу В. А. Фока. (*Прим. перев.*)

от координат как наблюдаемой системы, так и инструмента. Всякое описание системы как таковой с помощью одной только волновой функции $\psi(t)$ оказывается невозможным. Таким образом, вмешательство измерительного аппарата разрушает каузальную связь между состоянием системы до измерения и состоянием системы после измерения. Это объясняет, почему в общем случае мы не можем предсказать достоверно, в каком состоянии окажется система после измерения¹⁰⁾.

Для того чтобы показать, каким образом понятия, используемые при описании явления, оказываются связанными с методом наблюдения, и как это влияет на применение принципа причинности, рассмотрим пример возбужденного атома, который испускает фотон при переходе в основное состояние. Этот пример в то же время явится новой иллюстрацией дополнительности волнового и корпускулярного аспектов поведения квантового объекта.

Предположим, что атом находится в возбужденном состоянии в момент времени $t = 0$; пусть τ — его среднее время жизни, а $\hbar\omega$ — энергия испускаемого фотона. Попытаемся точно определить момент испускания фотона. Для этого полностью окружим атом соответствующими счетчиками; один из этих счетчиков сработает при прохождении фотона. Зная момент прохождения фотоном счетчика, расстояние, отделяющее атом от счетчика, и скорость света c , можно без труда вычислить момент испускания фотона. Однако квантовая теория делает по этому поводу выводы только статистического характера. Состояние системы атом + фотон легко описать, если иметь в виду ситуацию, возникающую по истечении времени $t \gg \tau$: атом почти наверняка находится в основном состоянии, а фотон (в хорошем приближении) — примем это без доказательства — представляется волновым пакетом $\psi(r, t)$, причем зависимость от t и r — расстояния от фотона до атома — с точностью до постоянной выражается в виде

$$\psi(r, t) = \begin{cases} 0, & \text{если } r > ct, \\ \frac{1}{r} \exp\left[-\left(i\omega + \frac{1}{2\tau}\right)\left(t - \frac{r}{c}\right)\right], & \text{если } r < ct. \end{cases} \quad (34)$$

¹⁰⁾ Статистические предсказания, касающиеся результатов измерения, естественно получаются при исследовании механизма самой измерительной операции, исследовании, в котором измерительный инструмент рассматривается как квантовый объект, а совокупность система + измерительный инструмент изменяется, следуя принципу причинности согласно уравнению Шредингера. Четкое и простое изложение вопроса о механизме измерения дано в книге *F. London et E. Bauer, La Théorie de l'observation en Mécanique Quantique*, Ed. Hermann (Paris, 1939). Более подробный разбор этой проблемы можно найти в книгах: *И. фон Нейман, Математические основы квантовой механики, «Наука», 1964 г.; Д. Бом, Квантовая теория, «Наука», 1965.*

Вероятность детектировать фотон на расстояние R от атома равна нулю пока $t < R/c$ и равна $\exp[-(t - R/c)/\tau]$ с точностью до постоянной во все последующие моменты времени, откуда и следует хорошо известный экспоненциальный закон распада.

Именно этот закон мы наблюдаем экспериментально на очень большом числе распадов. Однако квантовая теория не способна предсказать время распада каждого из атомов отдельно. Можно сделать вывод, что квантовая теория хорошо описывает распад статистических ансамблей возбужденных атомов, но не описывает полностью отдельное явление распада.

Ответ на это замечание следующий. Понятие времени распада неотделимо от экспериментального устройства, которое его измеряет, и не может рассматриваться как свойство, характеризующее эволюцию атома вне зависимости от этого устройства. Действительно, существуют и другие экспериментальные устройства, «дополнительные» к рассмотренному, позволяющие выявить иные аспекты явления и несовместимые с самим понятием о моменте испускания фотона. Это все те устройства, в которых мы наблюдаем интерференционные эффекты света. Здесь волна (34) оказывается разделенной на два волновых пакета, которые вновь интерферируют после прохождения различных оптических путей. Наблюдение интерференционной картины возможно, если разность оптических путей меньше протяженности волны (34) в пространстве¹¹⁾. Следовательно, пространственная протяженность волны существенна для самой постановки опыта, а поэтому понятие момента испускания фотона теряет всякий смысл.

Принцип причинности в его обычном понимании применим к системе атом + фотон до тех пор, пока она еще не провзаимодействовала с измерительным прибором. В течение этого периода времени возможно описание динамического состояния системы с помощью волновой функции, подчиняющейся уравнению Шредингера. При этом фотон представляется пакетом расходящихся волн (34), фронт которого, $r = ct$ удаляется от атома со скоростью c . Однако это причинное описание перестает быть справедливым как только система атом + фотон вступает во взаимодействие с инструментом наблюдения. Здесь уже нельзя говорить об изолированной системе, так как ансамбль система + инструмент наблюдения составляет единую сущность; свойства, приписываемые системе, в действительности являются

¹¹⁾ Среднее время жизни возбужденного состояния атома при испускании видимого света порядка 10^{-8} сек. Поэтому длина ct испускаемого цуга волн порядка 3 м. Интерференционную картину удавалось наблюдать при разности оптических путей порядка метра. Это подтверждает наши выводы относительно пространственной протяженности цуга волн и неопределенности понятия момента испускания.

свойствами ансамбля. Поэтому не может существовать строгой причинной связи между состояниями системы до и после измерения.

Это положение дел резко отличается от классической ситуации, где все динамические переменные системы строго определены в любой момент, а их эволюция во времени строго детерминирована. Динамические переменные квантовой системы определяются только с учетом соотношений неопределенности между парами дополнительных переменных, так что их временная эволюция детерминирована только частично. Сколь бы шокирующим не выглядело это ограничение принципа причинности, оно не входит в противоречие ни с одним опытным фактом, ибо временная эволюция совокупности динамических переменных системы может экспериментально наблюдаться только в рамках приближения, соответствующего соотношениям неопределенности.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Показать, что гамильтониан частицы в электромагнитном поле (уравнение (II.25)) является эрмитовым оператором и что вследствие этого норма некоторого решения Ψ уравнения Шредингера сохраняется во времени. Показать, что в этом случае можно написать уравнение непрерывности типа (11), если при определении потока выбрать выражение, вытекающее из принципа соответствия с классической механикой, а именно

$$J = \text{Re} \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{im} \nabla - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \right) \Psi \right],$$

где $\mathbf{A}$ — векторный потенциал электромагнитного поля.

2. Частица с массой m перемещается в поле действия потенциала $V(x)$, который при $x \rightarrow \pm\infty$ асимптотически (быстрее $1/|x|$) стремится к V_+ и V_- . Введем волновые числа $k_{\pm} = \sqrt{2m(E - V_{\pm})}/\hbar$ и рассмотрим решения $u_E(x)$, асимптотическое поведение которых выражается формулами:

$$\begin{aligned} u_E &\sim e^{ik_-x} + R e^{-ik_-x} && \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ u_E &\sim S e^{ik_+x} && \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Сложив решения этого типа, образуем волновой пакет (нормированный на единицу), описывающий частицу, движущуюся в направлении возрастания x . Показать, что по прошествии достаточного интервала времени этот пакет окажется разделенным на пакет проходящих волн и пакет отраженных, причем вероятности найти частицу в первом и втором пакетах равны соответственно $(k_+/k_-)|S|^2$ и $|R|^2$.

3. Волна, сопоставляемая частице, движущейся вдоль оси x , выражается формулой

$$\psi(x) = (2\pi\xi^2)^{-1/4} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4\xi^2}\right).$$

Вычислить волновую функцию $\varphi(p)$ в импульсном пространстве. Проверить, что как $\psi(x)$, так и $\varphi(p)$ нормированы на единицу. Вычислить средние значения x и x^2 , используя последовательно выражения (13) и (21), и сравнить результаты. Вычислить средние p , p^2 и $\exp(ipX/\hbar)$ (X — заданная вещественная постоянная), применяя последовательно выражения (14) и (20) и сравнить результаты.

4. Показать, что волновой пакет, для которого $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$ (минимизирующий волновой пакет) имеет вид

$$(2\pi\xi^2)^{-1/4} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4\xi^2}\right],$$

причем $\langle x \rangle = x_0$, $\langle p \rangle = p_0$, $\Delta x = \xi$, $\Delta p = \hbar/2\xi$.

5. Пусть $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$ средние значения x и канонически сопряженного импульса p для системы в динамическом состоянии $\psi(x)$. Показать, что в динамическом состоянии $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x\right) \psi(x + \langle x \rangle)$ оба средние значения равны нулю.

6. Показать, что при измерении положения частицы в § 13,6 главную роль играет квантовая природа измерительного прибора (пучок света + микроскоп) и что соотношения неопределенности оказались бы нарушенными, если бы свет не был квантован. Показать на этом примере, что постоянная $\hbar$, входящая в соотношения неопределенности для электрона, не превышает постоянной, входящей в определение кванта света.

7. При измерении импульса методом отклонения в магнитном поле (§ 14, а) показать, что можно до некоторой степени уменьшить продолжительность измерения $\tau = \pi mc/e\mathcal{H}$, не меняя его точности, но точность определения самого времени измерения Δt остается неизменной. Обсудить на этом примере соотношение неопределенности время-энергия. Выяснить те же вопросы для длительности $1/\Delta\nu'$ измерения импульса в процессе столкновения с фотоном (§ 14, б).

8. Измерение импульса в § 14, б может быть осуществлено при замене фотона любой другой частицей. Это измерение основано на определении импульса, передаваемого этой частице электроном при столкновении. Обсудить соотношения неопределенности координата-импульс в этом случае в нерелятивистском приближении. Показать, что неопределенность, возникающая при измерении координаты электрона, зависит от постоянной $\hbar$, фигурирующей в соотношениях неопределенности для используемой частицы.

9. Квантовая частица проходит через диафрагму с отверстием d , снабженную обтюратором с рабочим временем τ . Показать, что между частицей и прибором (диафрагма + обтюратор) происходит обмен импульсом порядка $\hbar/d$ и энергией порядка $\hbar/\tau$.

10. При измерении положения электрона с помощью микроскопа (§ 13, 6) мы стремимся определить и его импульс путем точного измерения импульса, передаваемого микроскопу в процессе измерения. Показать, что точность измерения импульса может быть повышена только за счет соответствующего уменьшения точности измерения положения частицы, согласно соотношениям неопределенности.

11. В эксперименте Юнга используется пучок моноэнергетических частиц, исследуется интерференционная картина на экране, а в качестве детектора применяется камера Вильсона. Это возможно только, если камера Вильсона находится достаточно далеко от экрана Юнга. Показать, что наблюдение «траектории» каждой частицы в камере Вильсона не позволяет определить отверстие, через которое прошла частица (см. сноску⁷).

§ 1. Введение

В предыдущей главе мы изложили основы статистической интерпретации квантовой теории и с самой общей точки зрения рассмотрели внутреннюю логическую непротиворечивость теории, ее согласие с результатами опыта, а также новый специфический способ описания природных явлений. Теперь, ограничиваясь более узкими рамками волновой механики систем частиц (в нерелятивистском приближении), мы дополним и уточним статистическую интерпретацию теории в согласии с общими принципами.

Мы принимаем таким образом, что динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием волновой функции. В отличие от классической теории динамические переменные системы не могут быть все точно определены в каждый момент времени. При измерении одной какой-либо динамической переменной результаты измерения следуют некоторому вероятностному закону, который полностью определяется волновой функцией системы.

В гл. IV (раздел I) были сформулированы вероятностные законы, связанные с измерением координаты и импульса, а также были приведены общие формулы для средних значений функций координат в конфигурационном пространстве и функций координат в пространстве импульсов. Однако пока не были указаны правила, позволяющие получить статистическое распределение измерений в более общем случае, а именно, когда динамическая переменная является функцией как пространственных координат, так и компонент импульса. Это будет сделано в трех первых разделах данной главы, а основные постулаты изложены в разделе I.

Каждой динамической переменной $\mathcal{A}$ сопоставляется некоторый эрмитов оператор A , действующий в пространстве волновых функций; при этом среднее значение результатов измерения $\mathcal{A}$ дается некоторым выражением, получаемым с помощью оператора A и обобщающим формулы гл. IV (§ 5). Постулируя эти правила для всех динамических переменных и для всех функций от этих переменных, мы приходим к искомому статистическому

распределению. Его явное выражение тесно связано с решением задачи на собственные значения для оператора A . В разделе II будут изучены свойства собственных значений и собственных функций оператора A в частном случае, когда спектр собственных значений является дискретным, а собственные функции квадратично интегрируемы. Затем вероятностный закон будет получен при помощи разложения волновой функции физической системы по полной системе собственных функций оператора A . В разделе III та же проблема рассматривается в более общем случае, когда спектр собственных значений оператора содержит область, где спектр непрерывен.

В разделе IV с формальной точки зрения рассматривается проблема нахождения волновой функции квантовой системы, если осуществлено одновременное точное измерение полного набора совместных переменных. Если такое «максимальное наблюдение» не реализовано, информация относительно динамического состояния физической системы является неполной. В этом случае исследование поведения системы может быть продолжено на основе статистических методов, причем слово «статистических» следует понимать уже в обычном смысле.

Операторы, сопоставляемые двум совместным динамическим переменным, коммутируют между собой. Если бы все операторы попарно коммутировали, то все динамические переменные могли бы быть одновременно точно определены. Эта ситуация характерна для классической теории. В квантовой механике некоторые пары динамических переменных несовместны и соответствующие коммутаторы отличны от нуля. Поэтому коммутаторы операторов играют первостепенную роль в квантовой теории. Раздел V посвящен изучению коммутаторов, явному вычислению некоторых из них, а также выводу и исследованию некоторых уравнений, в которых понятие коммутатора особенно полезно.

Раздел I. ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ И ФИЗИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ

Всякий раз, когда нам потребуется пример для иллюстрации излагаемых положений, мы будем обращаться к примерам квантовых систем в одном измерении (см. гл. III) или в трех измерениях (системы, содержащие одну частицу). Следует однако помнить, что все результаты справедливы и в общем случае квантовых систем с любым числом измерений.

§ 2. Пространство волновых функций

Волновые функции, представляющие состояние квантовой системы, принадлежат функциональному пространству, которое следует точно определить. Для того, чтобы вероятностные

распределения $P(r)$ и $\Pi(p)$, введенные в § IV.2, имели смысл, необходимо и достаточно, чтобы волновая функция удовлетворяла условию нормировки (IV.3). Это приводит нас к следующему определению пространства волновых функций:

волновые функции, рассматриваемые в волновой механике, являются квадратично интегрируемыми функциями в конфигурационном пространстве, т. е. функциями вида $\psi(q_1, \dots, q_R)$, такими, что интеграл $\int |\psi(q_1, \dots, q_R)|^2 d\tau$ сходится¹⁾ (здесь $d\tau$ обозначает элемент объема конфигурационного пространства: $d\tau \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_R$).

Можно было бы еще более ограничить функциональное пространство, требуя выполнения условия нормировки на единицу (IV.3). Однако удобнее отказаться от этого ограничения. Как мы увидим ниже, это можно сделать, несколько модифицируя определения статистических распределений и вероятностей.

На языке математики определенное нами функциональное пространство называется *пространством Гильберта*. Действительно, оно обладает всеми свойствами, характеризующими пространство Гильберта. Перечислим эти свойства.

Во-первых, это *линейное пространство*. Если ψ_1 и ψ_2 квадратично интегрируемые функции, то их сумма, произведение каждой на комплексное число и вообще любые линейные комбинации вида $\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$, где λ_1 и λ_2 — произвольные заданные комплексные числа, также являются квадратично интегрируемыми функциями.

Во-вторых, в этом пространстве можно определить *скалярное произведение*. По определению скалярное произведение функции ψ на функцию φ выражается формулой

$$\langle \varphi, \psi \rangle \equiv \int \varphi^*(q_1, \dots, q_R) \psi(q_1, \dots, q_R) d\tau. \quad (1)$$

Если скалярное произведение равно нулю, говорят, что функции φ и ψ *ортогональны*. Норма N_ψ функции ψ есть скалярное произведение функции саму на себя

$$N_\psi \equiv \langle \psi, \psi \rangle.$$

Основные свойства скалярного произведения таковы:

а) скалярное произведение φ на ψ есть величина, комплексно сопряженная скалярному произведению ψ на φ , именно

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*; \quad (2)$$

¹⁾ Преобразование Фурье $\varphi(p_1, \dots, p_R)$ такой функции всегда существует: это тоже квадратично интегрируемая функция, обладающая той же нормой, что и функция $\psi(q_1, \dots, q_R)$. Вообще соответствие между φ и ψ является взаимнооднозначным, если условиться считать тождественными функции, отличающиеся значениями только на множестве меры нуль, что мы и будем делать в дальнейшем (см. Дополнение А).

б) скалярное произведение ψ на φ линейно по ψ , иными словами

$$\langle \varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi, \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi, \psi_2 \rangle \quad (3)$$

в) норма функции ψ есть неотрицательное вещественное число

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad (4)$$

и если $\langle \psi, \psi \rangle = 0$, то $\psi = 0$.

Все эти свойства становятся очевидными, если обратиться к самому определению скалярного произведения. Пользуясь свойствами а) и б), легко видеть, что зависимость скалярного произведения $\langle \varphi, \psi \rangle$ от функции φ не линейна, но «антилинейна»:

$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1, \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2, \psi \rangle. \quad (3')$$

Из свойств а), б) и в) следует очень важное свойство скалярного произведения, а именно *неравенство Шварца* (см. задачу 1)

$$|\langle \varphi, \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \varphi, \varphi \rangle \langle \psi, \psi \rangle}. \quad (5)$$

Знак равенства в формуле (5) имеет место в том и только в том случае, когда функции φ и ψ пропорциональны друг другу. Неравенство Шварца очевидно, обеспечивает сходимость интеграла (1), если функции φ и ψ являются квадратично интегрируемыми.

Помимо свойства линейности и возможности определения скалярного произведения пространство квадратично интегрируемых функций обладает еще свойством *полноты*; именно это обстоятельство позволяет отождествить его с пространством Гильберта. Свойство полноты означает, что всякая последовательность квадратично интегрируемых функций, удовлетворяющая критерию Коши, сходится (в смысле среднего квадратичного) к квадратично интегрируемой функции. Обратное, всякая квадратично интегрируемая функция может рассматриваться как предел (в смысле среднего квадратичного) последовательности квадратично интегрируемых функций, сходящейся в смысле Коши (*сепарабельность*)³⁾.

²⁾ Строго говоря, функция ψ может принимать значения, отличные от нуля на множестве значений аргументов меры нуль. По соглашению, упомянутому в сноске ¹⁾, такие функции не отличаются от нуля.

³⁾ Строгое и детальное исследование пространства Гильберта можно найти в книге: *M. H. Stone, Linear transformations in Hilbert Space, Amer. Math. Soc. (New-York, 1932)*. Основные свойства пространства Гильберта рассматриваются в книгах: *A. Lichnerowicz, Algebre et Analyse Linéaire, Masson (Paris, 1947)*; *И. фон Нейман, Математические основы квантовой механики, «Наука», 1964*. Понятие сходимости в смысле среднего квадратичного определяется в Дополнении А, сноска ⁴⁾.

§ 3. Определение средних значений

В § IV.5 каждой динамической переменной вида $F(\mathbf{r})$ или $G(\mathbf{p})$ мы сопоставили некоторый линейный оператор A , соответственно равный $F(\mathbf{r})$ или $G(-i\hbar\nabla)$; кроме того, было указано — это следовало из определений $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$, — что среднее значение каждой динамической переменной определяется выражением (IV.22), которое в новых обозначениях может быть записано в виде $\langle\Psi, A\Psi\rangle$. Если волновая функция не нормирована на единицу, то выражения (IV.2) и (IV.6) для $P(\mathbf{r})$ и $\Pi(\mathbf{p})$ должны быть разделены на норму $\langle\Psi, \Psi\rangle$ волновой функции и тогда выражение для среднего значения принимает вид $\langle\Psi, A\Psi\rangle/\langle\Psi, \Psi\rangle$.

Все это можно обобщить на случай произвольной динамической переменной. Постулируем, что:

а) Любой динамической переменной $\mathcal{A} = A(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ сопоставляется линейный оператор

$$A\left(q_1, \dots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}\right).$$

б) Если система находится в динамическом состоянии, определяемом волновой функцией $\Psi(q_1, \dots, q_R)$, то среднее значение динамической переменной есть

$$\langle A \rangle = \frac{\langle\Psi, A\Psi\rangle}{\langle\Psi, \Psi\rangle}. \quad (6)$$

Соответствие между классической функцией Гамильтона и гамильтонианом уравнения Шредингера (§ II.15) является частным случаем соответствия а) между динамическими переменными и линейными операторами. Замечания, сделанные в § II.15 по поводу этого соответствия, имеют силу и в общем случае. Следует иметь в виду, что координаты q являются декартовыми координатами. Далее, в самом определении оператора A имеется некоторая неопределенность, связанная с тем, что, используя принцип соответствия, мы заменяем величины, для которых справедливы законы обычной алгебры, операторами, которые, вообще говоря, могут не коммутировать; на практике эта неопределенность снимается в соответствии с эмпирическими правилами, указанными на стр. 77.

Если динамическая переменная $\mathcal{A}$ представляет физическую величину, то она является вещественной функцией q и p ; все результаты измерения $\mathcal{A}$, а следовательно и среднее значение $\langle A \rangle$ также являются вещественными. Таким образом, $\langle\Psi, A\Psi\rangle$ есть вещественная величина

$$\langle\Psi, A\Psi\rangle = \langle A\Psi, \Psi\rangle, \quad (7)$$

каким бы ни было динамическое состояние системы, т. е. какой бы ни была волновая функция Ψ . Иначе говоря (ср. стр. 123), оператор A должен быть эрмитовым (или самосопряженным). Нетрудно видеть, и мы это констатируем во всех встречающихся примерах, что поскольку операторы q_i и $-\hbar\partial/\partial q_i$ являются эрмитовыми, по принципу соответствия (а) любой вещественной динамической переменной всегда можно сопоставить эрмитов оператор; правило «симметризации» на стр. 77 и было сформулировано для этой цели.

Свойства эрмитовых операторов будут систематически изучены в § 5 и далее. Укажем уже сейчас одно важное свойство этих операторов. Если оператор A эрмитов, то среднее значение переменной $\mathcal{A}$, вычисленное с помощью линейной комбинации $\Phi + \lambda\Psi$ двух функций Φ и Ψ из функционального пространства, в котором действует оператор A , есть величина вещественная. Следовательно, выражение

$$\langle \Phi + \lambda\Psi, A(\Phi + \lambda\Psi) \rangle = \\ = \langle \Phi, A\Phi \rangle + \lambda \langle \Phi, A\Psi \rangle + \lambda^* \langle \Psi, A\Phi \rangle + |\lambda|^2 \langle \Psi, A\Psi \rangle$$

вещественно. Это должно быть так для любого значения комплексного числа λ . Ввиду того, что $\langle \Phi, A\Phi \rangle$ и $\langle \Psi, A\Psi \rangle$ являются вещественными величинами, мы делаем заключение, что

$$e^{i\alpha} \langle \Phi, A\Psi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \Psi, A\Phi \rangle,$$

где α — фаза комплексного числа λ , есть величина вещественная. Иными словами,

$$e^{i\alpha} (\langle \Phi, A\Psi \rangle - \langle A\Phi, \Psi \rangle) = e^{-i\alpha} (\langle A\Psi, \Phi \rangle - \langle \Psi, A\Phi \rangle)$$

и, поскольку это уравнение должно выполняться при любых α , находим, что величины в скобках в обеих частях равенства равны нулю. Таким образом, если Φ и Ψ являются функциями из функционального пространства, в котором определен оператор A , то

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle A\Phi, \Psi \rangle \quad (8)$$

или, что то же самое,

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle \Psi, A\Phi \rangle^*. \quad (8')$$

Равенство (8') часто рассматривается как определение эрмитовости оператора A .

Постулаты а) и б) позволяют нам определить статистическое распределение значений физической величины $\mathcal{A}$. Конец этого раздела и два последующих посвящены этой задаче.

§ 4. Отсутствие флуктуаций и проблема собственных значений

Флуктуации искомого статистического распределения определяются величиной среднего квадратичного отклонения ΔA

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \geq 0$$

(величина A^2 является динамической переменной того же рода, что и A , поэтому ее среднее значение дается постулатом б)). Когда отклонение ΔA равно нулю, флуктуации отсутствуют, и можно с определенностью утверждать, что $\mathcal{A}$ принимает значение, равное $\langle A \rangle$.

Выясним, какие требования на функцию Ψ накладывает условие $\Delta A = 0$. Применяя определение (6) к средним значениям операторов A и A^2 , можно привести условие к виду

$$\langle \Psi, A^2 \Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, A \Psi \rangle^2.$$

Однако величина $\langle \Psi, A^2 \Psi \rangle \equiv \langle \Psi, A(A\Psi) \rangle$ равна $\langle A\Psi, A\Psi \rangle$. Для доказательства достаточно применить свойство (8) эрмитового оператора A к функциям Ψ и $A\Psi$. Таким образом, имеем

$$\langle \Psi, A\Psi \rangle^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle \langle A\Psi, A\Psi \rangle.$$

Следовательно, мы находимся в ситуации, когда неравенство Шварца сводится к равенству, поэтому функции Ψ и $A\Psi$ пропорциональны друг другу. Флуктуации статистического распределения $\mathcal{A}$ обращаются в нуль для динамических состояний Ψ_a таких, что

$$A\Psi_a = a\Psi_a, \quad (9)$$

где a — некоторая постоянная.

Уравнение (9) есть уравнение задачи на собственные значения для оператора A . Примером такого уравнения является уже рассмотренное нами уравнение Шредингера, не зависящее от времени. Таким образом, мы приходим к заключению:

Физическая величина $\mathcal{A}$ обладает с достоверностью (т. е. с вероятностью, равной 1) определенным значением в том и только в том случае, когда динамическое состояние физической системы представляется функцией Ψ_a , т. е. собственной функцией эрмитового оператора, сопоставляемого $\mathcal{A}$, и это значение есть собственное значение оператора, соответствующее данной собственной функции.

Сказанное справедливо, в частности, по отношению к энергии $H(q; p)$ системы. Соответствующий оператор — гамильтониан Шредингера — действительно сопоставлялся энергии системы, когда мы рассматривали уравнение Шредингера, не зависящее от времени (гл. II, раздел III). Тогда мы приняли, что энергия системы принимает вполне определенное значение E , когда си-

стема находится в стационарном состоянии, а ее волновая функция есть собственная функция оператора H , соответствующая собственному значению E ; все это полностью согласуется с общими постулатами, введенными в этом параграфе.

Во всех рассуждениях, приведших нас к уравнению (9), предполагалось, что функции Ψ , $A\Psi$, $A^2\Psi$, входящие в скалярные произведения, принадлежат пространству Гильберта. Само уравнение (9) предполагает, что неизвестная функция должна быть квадратично интегрируемой.

Однако при такой постановке задача на собственные значения вполне может и не иметь решений. Именно так обстоит дело в случае уже рассмотренных операторов q_i и $-i\hbar \partial/\partial q_i$. Действительно, исследуем задачи на собственные значения для этих двух операторов в случае системы в одном измерении. Для оператора q имеем

$$(q - q')\psi(q) = 0,$$

что возможно только если $\psi(q)$ равна нулю всюду, кроме точки $q = q'$. Не существует ни одного квадратично интегрируемого решения, удовлетворяющего такому условию; искомое решение должно было бы быть очень странной функцией, равной нулю всюду, кроме одной точки. Мы вернемся к этому вопросу в § 8. Для оператора $-i\hbar \partial/\partial q_i$ задача на собственные значения имеет вид

$$-i\hbar \frac{d}{dq} \psi(q) = p' \psi(q).$$

Она имеет единственное решение, определенное с точностью до постоянного множителя, каким бы ни было значение p' : им является функция $e^{ip'q/\hbar}$. Это решение не является квадратично интегрируемым.

Мы видим, что для двух рассмотренных операторов указанная выше постановка задачи на собственные значения не имеет смысла. Чтобы получить достаточно общие результаты, следует рассматривать решения задачи на собственные значения (9), не являющиеся квадратично интегрируемыми. Ранее мы уже исследовали одно уравнение на собственные значения частного вида, а именно уравнение Шредингера для одномерных систем (см. гл. III), и можем основываться на результатах этого исследования. Спектр собственных значений гамильтониана Шредингера в общем случае состоит из двух частей: ряда дискретных собственных значений, собственные функции которых имеют конечную норму, и непрерывного спектра собственных значений, собственные функции которого ограничены во всем пространстве, но имеют бесконечную норму. Путем суперпозиции собственных функций непрерывного спектра, принадлежащих со-

седним значениям энергии, можно построить квадратично интегрируемые функции, соответствующие энергии, которая, как это подсказывает интуиция, если и не имеет точного значения, то во всяком случае определяется со сколь угодно малой квадратичной ошибкой.

Уточним это утверждение, возвращаясь к обозначениям § III.13. Исходя из собственной функции $y(x; \epsilon)$, принадлежащей собственному значению ϵ непрерывного спектра оператора H

$$Hy(x; \epsilon) = \epsilon y(x; \epsilon), \quad (10)$$

мы строим «собственный дифференциал» ⁴⁾

$$Y_\epsilon(x; \delta\epsilon) = (\delta\epsilon)^{-1/2} \int_{\epsilon}^{\epsilon+\delta\epsilon} y(x; \epsilon') d\epsilon'. \quad (11)$$

Это — квадратично интегрируемая функция, и вычисленные с ее помощью величины $\langle H \rangle$ и ΔH имеют вполне определенный смысл. Пользуясь уравнениями (10) и (11), легко видеть, что

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{\langle Y_\epsilon, HY_\epsilon \rangle}{\langle Y_\epsilon, Y_\epsilon \rangle} \underset{\delta\epsilon \rightarrow 0}{\sim} \epsilon + O(\delta\epsilon), \\ \langle H^2 \rangle &= \frac{\langle Y_\epsilon, H^2 Y_\epsilon \rangle}{\langle Y_\epsilon, Y_\epsilon \rangle} \underset{\delta\epsilon \rightarrow 0}{\sim} \epsilon^2 + \epsilon O(\delta\epsilon). \end{aligned}$$

Следовательно, квадратичное отклонение $\Delta H \equiv \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}$ при $\delta\epsilon \rightarrow 0$ ведет себя как $(\epsilon\delta\epsilon)^{1/2}$. Оно может быть сделано сколь угодно малым. Этот результат может быть выражен следующим образом.

С помощью суперпозиции собственных функций (с бесконечной нормой), принадлежащих собственным значениям, лежащим в ограниченной области $(\alpha, \alpha + \delta\alpha)$ непрерывного спектра оператора A (если он существует), можно построить квадратично интегрируемые функции, причем квадратичное отклонение распределения значений A от среднего значения $(\approx \alpha + O(\delta\alpha))$ может быть сделано сколь угодно малым, если выбрать достаточно малыми размеры $\delta\alpha$ области.

Ясно, что задача на собственные значения, выражаемая уравнением (9), должна играть фундаментальную роль не только в области дискретного спектра, но также и в области непрерывного спектра, когда собственные функции уже не принадлежат пространству Гильберта. Займемся поэтому систематическим изучением этой задачи на собственные значения.

⁴⁾ Множитель $(\delta\epsilon)^{-1/2}$ вводится в определение «собственного дифференциала» для того, чтобы норма оставалась конечной при $\delta\epsilon \rightarrow 0$.

Раздел II. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

§ 5. Собственные значения и собственные функции эрмитового оператора

Рассмотрим уравнение на собственные значения

$$A\psi_a = a\psi_a. \quad (9)$$

В этом разделе мы будем рассматривать только собственные функции ψ_a , принадлежащие пространству Гильберта. Следовательно, всюду подразумевается только дискретный спектр собственных значений. Общее исследование, включающее и непрерывный спектр (если он существует), будет проведено в разделе III.

Поскольку A есть линейный оператор, то:

1. Если ψ_a есть собственная функция, то $c\psi_a$, где c — произвольная постоянная, также есть собственная функция, принадлежащая тому же собственному значению. Чтобы фиксировать эту постоянную, обычно собственные функции *нормируют* на единицу:

$$\langle \psi_a, \psi_a \rangle = 1.$$

После этого функция ψ_a определена с точностью до произвольной постоянной фазы.

2. Если две линейно независимые функции $\psi_a^{(1)}, \psi_a^{(2)}$ ⁵⁾ принадлежат одному и тому же собственному значению, то то же самое имеет место для любой линейной комбинации этих функций. Говорят, что в этом случае имеется *вырождение*. Максимальное число линейно независимых собственных функций, принадлежащих одному собственному значению, называется *порядком* (или *кратностью*) вырождения данного собственного значения (мы уже встречали примеры вырождения второго порядка в гл. III при изучении непрерывного спектра).

Из определения эрмитовости и свойства (8) получаем два фундаментальных результата.

1°. *Все собственные значения вещественны.* В самом деле, умножая скалярно обе стороны уравнения (9) слева на функцию ψ_a , обнаруживаем, что a равно среднему значению A в динамическом состоянии ψ_a

$$a = \frac{\langle \psi_a, A\psi_a \rangle}{\langle \psi_a, \psi_a \rangle},$$

а эта величина, по определению эрмитовости, вещественна.

⁵⁾ Две функции ψ_1 и ψ_2 линейно независимы, если не существует отличных от нуля постоянных λ_1, λ_2 таких, что $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0$.

2°. Две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу (см. § III. 13). Пусть

$$A\psi_1 = a_1\psi_1, \quad A\psi_2 = a_2\psi_2.$$

Умножая первое уравнение слева на ψ_2 , а второе уравнение — справа на ψ_1 и вычитая, получаем, учитывая свойство (8),

$$0 = \langle \psi_2, A\psi_1 \rangle - \langle A\psi_2, \psi_1 \rangle = (a_1 - a_2) \langle \psi_2, \psi_1 \rangle.$$

Следовательно, если $a_1 \neq a_2$, то

$$\langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0.$$

Таким образом, две собственные функции ψ_1, ψ_2 , принадлежащие различным собственным значениям, линейно независимы. Действительно, предположим, что можно найти два числа λ_1 и λ_2 таких, что

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0.$$

Умножая каждый член левой части уравнения слева на ψ_1 , получаем, учитывая свойство ортогональности,

$$\lambda_1 \langle \psi_1, \psi_1 \rangle = 0$$

и следовательно λ_1 равно нулю. Аналогично показываем, что $\lambda_2 = 0$.

Если собственное значение a вырождено и кратность вырождения равна n , то каждая собственная функция, соответствующая этому собственному значению, может быть представлена в виде линейной комбинации n линейно независимых собственных функций $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}$ какого-либо частного выбора. Существует большой произвол в выборе этих базисных собственных функций. Однако всегда можно добиться, чтобы они были нормированы на единицу и были ортогональны друг другу. Для этого, исходя из произвольной совокупности линейно независимых функций $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}$, можно, например, провести следующие операции (процесс ортогонализации Шмидта): определяем $\varphi^{(1)}$ равенством

$$c_1\varphi^{(1)} = \psi^{(1)},$$

находим постоянную c_1 из условия $\langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(1)} \rangle = 1$, так что

$$|c_1|^2 = \langle \psi^{(1)}, \psi^{(1)} \rangle.$$

Определяем $\varphi^{(2)}$ равенством

$$c_2\varphi^{(2)} = \psi^{(2)} - \varphi^{(1)} \langle \varphi^{(1)}, \psi^{(2)} \rangle.$$

Левая часть не равна нулю, поскольку $\psi^{(1)}$ и $\psi^{(2)}$ линейно независимы. Ясно, что $\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)} \rangle = 0$. Выбираем c_2 из условия

$\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(2)} \rangle = 1$. Далее, определяем $\varphi^{(3)}$ равенством

$$c_3 \varphi^{(3)} = \varphi^{(3)} - \varphi^{(1)} \langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(3)} \rangle - \varphi^{(2)} \langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(3)} \rangle.$$

Эта функция, очевидно, не равна нулю, ортогональна к $\varphi^{(1)}$ и $\varphi^{(2)}$ и может быть нормирована соответствующим выбором c_3 . И так далее. Полученные таким образом n функций $\varphi^{(1)}, \dots, \varphi^{(n)}$ удовлетворяют $n(n+1)/2$ соотношениям

$$\langle \varphi^{(l)}, \varphi^{(m)} \rangle = \delta_{lm} \quad (l, m = 1, 2, \dots, n),$$

где δ_{lm} — символ Кронекера:

$$\delta_{lm} = \begin{cases} 1, & \text{если } l = m, \\ 0, & \text{если } l \neq m. \end{cases}$$

Говорят, что эти функции образуют совокупность *ортонормированных функций*.

Изучение вырожденных собственных значений должно быть дополнено следующим утверждением, которое мы примем без доказательства³⁾. Если кратность вырождения бесконечна, т. е. если можно найти произвольно большое число линейно независимых собственных функций, принадлежащих этому собственному значению, то всегда можно построить последовательность (бесконечную счетную) $\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(r)}, \dots$ ортонормированных собственных функций, такую, что всякая собственная функция, принадлежащая данному собственному значению, может быть разложена в ряд по этим функциям.

Можно также показать³⁾, что собственные значения образуют *дискретную* последовательность (конечную или бесконечную счетную) $a_1, a_2, \dots, a_p, \dots$. Это свойство является характерным для собственных значений, собственные функции которых принадлежат пространству Гильберта.

§ 6. Разложение волновой функции в ряд по ортонормированным собственным функциям

Как мы видели, каждому собственному значению a_p оператора A соответствует последовательность *ортонормированных собственных функций*

$$\varphi_p^{(1)}, \varphi_p^{(2)}, \dots, \varphi_p^{(r)}, \dots,$$

содержащая один элемент, конечное число элементов или бесконечное число элементов, если собственное значение является соответственно невырожденным, вырожденным с конечной кратностью или вырожденным с бесконечной кратностью. Обозначим символом $\{\varphi_p^{(r)}\}$ множество, образованное всеми этими

функциями. Всякая функция из этого множества удовлетворяет соотношениям:

$$A\varphi_p^{(r)} = a_p \varphi_p^{(r)}, \quad (12)$$

$$\langle \varphi_p^{(r)}, \varphi_q^{(s)} \rangle = \delta_{pq} \delta_{rs}. \quad (13)$$

Возникает вопрос о возможности представления произвольной волновой функции ψ из пространства Гильберта в виде функционального ряда по функциям системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$. Это, очевидно, возможно, если ψ есть собственная функция оператора A , и в этом случае единственно отличными от нуля членами ряда будут члены, соответствующие функциям, принадлежащим тому же собственному значению. Если это возможно для произвольной функции ψ , говорят, что $\{\varphi_p^{(r)}\}$ есть *полная система*.

Укажем без доказательства³⁾ некоторые свойства разложения в ряд по ортонормированным системам функций.

Пусть $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ последовательность ортонормированных функций.

1) Если ψ разлагается в ряд по этим функциям

$$\psi = \sum_n c_n u_n,$$

то коэффициенты разложения определяются формулой

$$c_n = \langle u_n, \psi \rangle$$

и удовлетворяют равенству Парсеваля

$$\sum_n |c_n|^2 = \langle \psi, \psi \rangle.$$

2) Обратно, если числовой ряд $\sum_n |c_n|^2$ сходится к числу N , то разложение $\sum_n c_n u_n$ сходится (в смысле среднего квадратичного) к функции ψ с нормой N .

3) Если функциональные ряды $\sum_n c_n u_n$ и $\sum_n d_n u_n$ сходятся соответственно к ψ и φ , то ряд $\sum_n d_n^* c_n$ сходится к скалярному произведению φ на ψ

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \sum_n d_n^* c_n.$$

4) Какой бы ни была квадратично интегрируемая функция ψ , ряд

$$\hat{\psi} = \sum_n u_n \langle u_n, \psi \rangle$$

сходится всегда; разность $\psi - \hat{\psi}$ ортогональна ко всем функциям u_n , а норма ее равна $\langle \psi, \psi \rangle - \langle \hat{\psi}, \hat{\psi} \rangle$. Таким образом, всегда

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq \langle \hat{\psi}, \hat{\psi} \rangle;$$

если реализуется равенство, то $\psi = \hat{\psi}$.

Все эти свойства сохраняются при нумерации функции u несколькими дискретными индексами. Следовательно, они выполняются и для системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$. В частности, если система $\{\varphi_p^{(r)}\}$ полна, то любая волновая функция Ψ может быть представлена рядом

$$\Psi = \sum_{p, r} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}, \quad (14)$$

коэффициенты которого равны

$$c_p^{(r)} = \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle \quad (15)$$

и удовлетворяют равенству Парсевала

$$\sum_{p, r} |c_p^{(r)}|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle. \quad (16)$$

Кроме того скалярное произведение двух волновых функций Ψ_1, Ψ_2 может быть представлено в виде

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \sum_{p, r} \langle \Psi_1, \varphi_p^{(r)} \rangle \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi_2 \rangle. \quad (17)$$

Если не преследовать целей математической строгости, то уравнения (15) и (16) легко получаются, если подставить (14) в правые части этих уравнений и воспользоваться соотношениями ортонормированности (13). Равенство (17) получается аналогичным образом.

Бросается в глаза аналогия с обычным комплексным векторным пространством. Полная ортонормированная система функций играет роль базисной системы ортогональных друг другу векторов единичной длины. Функция Ψ есть вектор в этом пространстве (с бесконечным числом измерений), коэффициенты $\langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle$ суть компоненты по направлениям базисных векторов (уравнение (15)), а норма этого вектора равна сумме квадратов модулей составляющих (уравнение (16)). Скалярное произведение Ψ_2 на Ψ_1 равно сумме произведений каждой компоненты Ψ_2 на величину, комплексно сопряженную соответствующей компоненте Ψ_1 .

§ 7. Статистическое распределение результатов измерений величины, оператор которой обладает полной системой собственных функций с конечной нормой

Возможность представить всякую волновую функцию Ψ разложением типа (14) существенно облегчает изучение всех проблем, касающихся оператора A . Предположим, что оператор A обладает полной системой ортонормированных собственных функций (примером может служить гамильтониан гармонического осциллятора, рассмотренный далее в гл. XII). Выбор такой системы несомненно не является единственным, всегда можно изменить фазы функций или, например, заменить ортонормированные функции, принадлежащие одному собственному значению, ортонормированными линейными комбинациями этих функций. Однако результаты, которые будут получены ниже, не зависят от конкретного выбора системы.

A priori функция $A\Psi$ не обязана быть квадратично интегрируемой. Однако, согласно (14),

$$A\Psi = \sum_{p,r} c_p^{(r)} A\varphi_p^{(r)} = \sum_{p,r} a_p c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

Этот ряд сходится (§ 6, свойства 1) и 2)) в том и только в том случае, если сходится ряд $\sum_{p,r} a_p^2 |c_p^{(r)}|^2$, и тогда сумма числового ряда равна норме $A\Psi$. Мы получаем критерий принадлежности $A\Psi$ пространству Гильберта.

Аналогичные выводы можно сделать относительно функции $A^2\Psi$. В самом общем случае, исходя из функции $F(x)$ и основываясь на разложении (14) при условии его сходимости, можно определить оператор $F(A)$ как функцию оператора A . Его действие на функцию Ψ определяется равенством

$$F(A)\Psi = \sum_{p,r} F(a_p) c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

Оператор вполне определен, если данный функциональный ряд сходится, т. е. определен для всех тех функций Ψ , для которых сходится числовой ряд

$$\sum_{p,r} |F(a_p)|^2 |c_p^{(r)}|^2.$$

Читатель легко проверит, что определенная таким образом функция $F(A)\Psi$ не зависит от конкретного выбора системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$.

В частности, оператор $e^{i\xi A}$, где ξ некоторый заданный параметр, определен для всех функций, принадлежащих пространству

Гильберта. Действительно,

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_{p,r} e^{i\xi a_p} c_p^{(r)} \Phi_p^{(r)}, \quad (18)$$

причем критерий сходимости функционального ряда сводится к сходимости числового ряда $\sum_{p,r} |c_p^{(r)}|^2$, что всегда имеет место, если Ψ принадлежит пространству Гильберта.

Теперь мы уже можем определить статистическое распределение величины $\mathcal{A}$ для любого динамического состояния физической системы. Действительно, характеристическая функция $f(\xi)$ этого распределения⁶⁾; знание которой позволяет полностью описать распределение, есть, по определению, среднее значение величины $e^{i\xi A}$ в этом состоянии. Воспользовавшись постулатом б) из § 3, мы определим это среднее значение выражением

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}$$

(которое всегда имеет смысл, даже если среднее значение A не определено).

Пусть теперь Ψ есть волновая функция, представляющая рассматриваемое динамическое состояние. Пользуясь разложениями (14) и (18), а также выражением (17) для скалярного произведения, находим

$$f(\xi) = \sum_p \omega_p e^{i\xi a_p},$$

⁶⁾ С точностью до постоянного множителя $f(\xi)$ является образом Фурье искомого распределения. Пусть X — случайная величина, принимающая все значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, а $P(x)$ — вероятность обнаружить X в интервале $(x, x+dx)$. Тогда характеристическая функция $f(\xi)$ статистического распределения этой случайной величины есть среднее значение $\exp i\xi X$:

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} P(x) dx.$$

Если же X может принимать только некоторые дискретные значения $x_1, \dots, x_n, \dots$ с вероятностями $\omega_1, \dots, \omega_n, \dots$, то

$$f(\xi) = \sum_n \omega_n e^{i\xi x_n}.$$

В более общей форме: если $F(x)$ есть вероятность того, что $X \leq x$, то имеем

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} dF(x),$$

где интеграл следует понимать в смысле Стильтьеса.

где мы ввели обозначение

$$w_p = \frac{\sum_r |c_p^{(r)}|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\sum_r |\langle \Phi_p^{(r)}, \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}.$$

Полученное выражение для характеристической функции распределения приводит нас к заключению, что:

1. Величина $\mathcal{A}$ может принимать только значения $a_1, a_2, \dots, a_p, \dots$, т. е. собственные значения сопоставленного ей оператора.

2. Вероятность того, что $\mathcal{A}$ примет значение a_p , есть w_p .

Нетрудно установить, что $\sum_p w_p = 1$ (равенство Парсеваля) и что среднее значение $\mathcal{A}$ дается выражением

$$\langle A \rangle = \sum_p w_p a_p$$

при условии сходимости этого ряда и что в общем случае среднее значение функции $f(A)$, если оно существует, выражается формулой

$$\langle f(A) \rangle = \sum_p w_p f(a_p). \quad (19)$$

В частности, для того чтобы $\mathcal{A}$ с достоверностью принимало какое-либо заданное значение, необходимо и достаточно, чтобы Ψ являлась собственной функцией, принадлежащей этому собственному значению, в согласии с выводами § 4.

Полученные результаты можно представить в форме, которая делает еще более наглядным тот факт, что они не зависят от выбора системы функций $\{\Phi_p^{(r)}\}$. Действительно, функция Ψ_p , определенная равенством

$$\Psi_p = \sum_r \Phi_p^{(r)} \langle \Phi_p^{(r)}, \Psi \rangle,$$

очевидно не зависит от этого выбора (см. задачу 4). Тогда разложение (14) может быть представлено в форме

$$\Psi = \sum_p \Psi_p. \quad (20)$$

Иначе говоря, можно (и это уже единственным образом) представить Ψ в виде суперпозиции собственных функций оператора A , принадлежащих различным собственным значениям. Тогда вероятность w_p найти значение a_p равна отношению норм Ψ_p и Ψ :

$$w_p = \frac{\langle \Psi_p, \Psi_p \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (21)$$

Раздел III. СТАТИСТИКА ИЗМЕРЕНИЙ В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ

§ 8. Трудности описания непрерывного спектра.

Введение δ -функции Дирака

Все полученные нами результаты теряют свою силу, если система функций $\{\varphi_p^{(r)}\}$ не является полной. Мы видели, что это далеко не исключительный случай. Однако обсуждение в § 4 указывает на возможный путь расширения области применимости развитой теории. На этом пути мы по-прежнему будем исходить из уравнения на собственные значения (9), не накладывая однако на решения строгого требования принадлежности к пространству Гильберта. Но для этого нам потребуется распространить на решения, не имеющие конечной нормы, понятия ортогональности и нормировки.

Рассмотрим два примера, относящиеся к одномерным системам: определение статистических распределений по положению и по импульсу. В этом случае статистические распределения известны, что поможет провести формальное расширение результатов предыдущего параграфа. Координата q может принимать все возможные значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, причем вероятность найти q в интервале $(q', q' + dq')$ равна

$$P(q') dq' = |\psi(q')|^2 dq', \quad (22)$$

где $\psi(q)$ есть волновая функция (по предположению нормированная на единицу), представляющая динамическое состояние физической системы. С другой стороны, импульс p , представляемый оператором $-i\hbar d/dq$, может принимать все возможные значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, и вероятность найти p в интервале $(p', p' + dp')$ равна

$$\Pi(p') dp' = |\varphi(p')|^2 dp', \quad (23)$$

где $\varphi(p)$ — подходящим образом нормированный образ Фурье волновой функции $\psi(q)$.

В обоих случаях спектр возможных значений рассматриваемых величин является непрерывным. В этом и состоит основное отличие от ситуации, изученной выше, когда мы имели дискретный спектр и возможность представить всякую волновую функцию ψ в виде ряда (см. уравнения (14) или (20)), каждый член которого соответствует одному из возможных значений из этого спектра. Естественным обобщением на случай непрерывного спектра является представление волновой функции не в форме ряда, а в форме интеграла.

С формальной точки зрения в случае полностью дискретного спектра ход рассуждений был таков.

Эрмитов оператор A обладает рядом дискретных собственных значений, которые мы ради простоты будем считать невырожденными. Каждому собственному значению a_n соответствует собственная функция φ_n (определяемая с точностью до фазы), причем

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n, \quad (24)$$

$$\langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}. \quad (25)$$

Поскольку ортонормированная система $\{\varphi_n\}$ полна, всякая функция (по предположению нормированная на единицу) может быть представлена рядом

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n, \quad (26)$$

где, вследствие условий ортонормированности (25),

$$\langle \varphi_n, \psi \rangle = \sum_{n'} c_{n'} \langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = c_n. \quad (27)$$

Используя те же соотношения, для характеристической функции находим

$$\langle \psi, e^{i\xi A} \psi \rangle = \sum_{n, n'} c_n^* c_{n'} e^{i\xi a_{n'}} \langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n}, \quad (28)$$

откуда делается вывод, что вероятность того, что A принимает значение a_n , равна квадрату модуля коэффициента при φ_n в разложении (26), т. е. $|c_n|^2$.

Действуя по аналогии, обозначим с помощью $u(p'; q)$ собственную функцию оператора $p = -i\hbar d/dq$, принадлежащую собственному значению p' :

$$pu(p'; q) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} u(p'; q) = p' u(p'; q). \quad (24')$$

Продолжая формальную аналогию, представим волновую функцию $\psi(q)$ в виде интеграла по формуле

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p') u(p'; q) dp'.$$

Здесь $|c(p')|^2 dp'$ должно быть вероятностью того, что p находится в интервале $(p', p' + dp')$. Поэтому необходимо, чтобы $|c(p')|^2 = |\varphi(p')|^2$, т. е. чтобы $c(p')$ было равным $\varphi(p')$ с точностью до фазового множителя. Поскольку собственная функция сама по себе определяется только с точностью до произвольного постоянного комплексного множителя, можно всегда выбрать его так, чтобы аналог уравнения (26) принял

форму

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p') u(p'; q) dp'. \quad (26')$$

Коэффициент $\varphi(p')$, принадлежащий собственному значению p' , по формуле, обобщающей соотношение (27), должен быть равен

$$\varphi(p') = \langle u(p'; q), \psi(q) \rangle,$$

что при подстановке, вместо $\psi(q)$, интегрального представления (26') дает

$$\varphi(p') = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p'') \langle u_{p'}, u_{p''} \rangle dp''. \quad (29)$$

Здесь мы используем сокращенное обозначение $u_{p'}$ для функции, являющейся собственной функцией, принадлежащей собственному значению p' . Соотношение (29) должно выполняться для любой волновой функции $\varphi(p')$ в пространстве импульсов (единственное ограничение на эту функцию состоит в том, что она должна быть квадратично интегрируемой); это свойство $\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle$ обобщает соотношение ортонормированности (25).

Не существует регулярных функций от p' и p'' , которые могли бы удовлетворять соотношению (29). Однако, если не очень заботиться о математической строгости⁷⁾, можно, следуя Дираку, ввести «сингулярную функцию» $\delta(x)$, определяемую следующим свойством:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \\ = \begin{cases} f(x_0), & \text{если } x_0 \text{ лежит внутри интервала } (a, b), \\ 0, & \text{если } x_0 \text{ лежит вне интервала } (a, b) \end{cases} \end{aligned} \quad (30)$$

для всякой функции $f(x)$, непрерывной в точке $x = x_0$.

Уравнение (29) удовлетворяется, если

$$\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle = \delta(p' - p''), \quad (25')$$

⁷⁾ Мы уже нарушили требования математической строгости, когда написали уравнение (29). Правильная форма уравнения имеет вид

$$\varphi(p') = \langle u_{p'}, \int \varphi(p'') u_{p''} dp'' \rangle.$$

Чтобы получить отсюда уравнение (29), следует поменять порядок интегрирования внутри скалярного произведения и интегрирования по p'' . Эта операция, конечно, не является математически строгой, так как скалярное произведение $\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle$ расходится

что и является обобщением соотношений ортонормированности (25) на случай непрерывного спектра.

Можно представлять себе «функцию Дирака» δ наглядно как предел функции, равной нулю всюду, кроме маленького интервала около точки $x = 0$, где она имеет очень узкий и очень высокий максимум, причем такой, что интеграл от функции по всей числовой оси равен 1. В пределе, когда ширина максимума стремится к нулю, получим

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq 0, \\ +\infty, & \text{если } x = 0 \end{cases} \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (31)$$

Конечно, $\delta(x)$ не является функцией в обычном смысле, так как интеграл, если он существует, от функции, равной нулю всюду, кроме одной точки, должен быть равен нулю. Мы не будем здесь обсуждать проблему математического обоснования использования δ -функции Дирака. Оно потребовало бы введения совершенно нового понятия обобщенных функций, причем обычные функции (точнее, локально интегрируемые функции) должны рассматриваться как частный случай обобщенных. В математике говорят не о функции $\delta(x - x_0)$, а об обобщенной функции $\delta_{x_0}[f]$, определяемой как функционал от функции $f(x)$, равный $f(x_0)$. Другими словами, определение (30) должно быть заменено соотношением

$$\delta_{x_0}[f] = f(x_0).$$

В виду того, что понятие обобщенной функции является новым и возможно незнакомым читателю, мы будем им пользоваться как можно реже и применять (некорректное) обозначение $\delta(x - x_0)$, которое, впрочем, имеет неоспоримые формальные преимущества. Основные правила вычислений с δ -функцией Дирака приведены в Дополнении А, где можно найти также общие сведения из теории обобщенных функций.

Вернемся к проблеме измерения p . Собственной функцией $u(p'; q)$ уравнения (24) является функция $ce^{ip'q/\hbar}$. Соотношение ортонормированности (25) выполняется при $c = (2\pi\hbar)^{-1/2}$; таким образом, имеем

$$u(p'; q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'q/\hbar}.$$

Далее, используя уравнение (А.22), находим

$$\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{(p'' - p') q}{\hbar}} dq = \delta(p' - p'').$$

Собственные функции $u_{p'}$ образуют полную систему, так как всякая квадратично интегрируемая функция $\psi(q)$ может быть представлена в форме

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p') \frac{e^{ip'q/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp',$$

т. е. в виде интеграла Фурье. Коэффициент $\varphi(p')$ этого «разложения по собственным функциям» равен скалярному произведению $\langle u_{p'}, \psi \rangle$. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle u_{p'}, \psi \rangle &= \left\langle u_{p'}, \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p'') u_{p''} dp'' \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p'') \langle u_{p'}, u_{p''} \rangle dp'' = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p'') \delta(p' - p'') dp'' = \varphi(p'). \end{aligned}$$

Итак, используя обобщенные соотношения ортонормированности, мы получили известное свойство взаимности преобразования Фурье.

Продолжая аналогию со случаем дискретного спектра, введем оператор $e^{i\xi p}$. Имеем

$$e^{i\xi p} u(p'; q) = e^{i\xi p'} u(p'; q),$$

следовательно,

$$e^{i\xi p} \psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p') e^{i\xi p'} u(p'; q) dp',$$

откуда получаем характеристическую функцию

$$\begin{aligned} f(\xi) &= \langle \psi, e^{i\xi p} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(p'') dp'' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi p'} \varphi(p') dp' \langle u_{p''}, u_{p'} \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(p'') dp'' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi p'} \varphi(p') dp' \delta(p' - p'') = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(p')|^2 e^{i\xi p'} dp'. \end{aligned}$$

Соответствующее статистическое распределение (см. сноску⁶)) и есть искомое распределение (23).

Обсуждение измерения координаты может быть проведено по той же схеме. Собственной функцией, принадлежащей собственному значению q' уравнения на собственные значения оператора q с правильной нормировкой, является $\delta(q' - q)$. Действительно по уравнению (A.19)

$$q\delta(q' - q) = q'\delta(q' - q).$$

Совокупность функций $\delta(q' - q)$, где q' может принимать все возможные значения от $-\infty$ до $+\infty$, образует ортонормированную систему, так как (см. уравнение (A.21))

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q - q') \delta(q - q'') dq = \delta(q' - q''),$$

и эта система является полной, ибо всякая волновая функция $\psi(q)$ может быть представлена в интегральной форме

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q') \delta(q' - q) dq'. \quad (32)$$

Легко проверить, что коэффициент $\psi(q')$ равен скалярному произведению $\langle \delta(q' - q), \psi(q) \rangle$. Аналогично находим, что квадрат модуля этого коэффициента, т. е. $|\psi(q')|^2$, действительно равен плотности вероятности того, что $q = q'$ в согласии с уравнением (22).

§ 9. Разложение по собственным функциям в общем случае. Условие замкнутости

Вернемся вновь к уравнению (9) на собственные значения

$$A\psi = a\psi.$$

Здесь мы уже не будем предполагать, что собственные решения уравнения имеют ограниченную норму. Потребуем только, чтобы скалярные произведения этих решений на произвольную волновую функцию (т. е. на любую функцию с ограниченной нормой) были ограничены.

В самом общем случае множество собственных значений задачи может содержать:

1°. Дискретный спектр значений a_n , которые образуют либо конечное множество, либо бесконечное, но счетное множество и могут быть перенумерованы дискретным целым индексом n .

2°. Непрерывный спектр значений $a(v)$, которые нумеруются непрерывным индексом v , изменяющимся в некоторой области.

Собственные функции дискретного спектра имеют конечную норму. Все свойства дискретного спектра были изучены в § 5, и мы не будем к этому возвращаться.

Пусть $\psi(v; q_1, \dots, q_R)$ — собственная функция непрерывного спектра, принадлежащая собственному значению $a(v)$. Это непрерывная функция параметра v , норма которой, очевидно, неограничена («вектор бесконечной длины» в функциональном пространстве). Однако будем предполагать, что собственный дифференциал

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta v}} \int_v^{v+\Delta v} \psi(v'; q_1, \dots, q_R) dv'$$

является функцией с ограниченной нормой, которая стремится к некоторой постоянной, когда Δv стремится к нулю. Мы знаем, что собственные функции непрерывного спектра гамильтониана физической системы в одном измерении обладают этим свойством (ср. гл. III); нетрудно проверить, что собственные функции операторов q и $-i\hbar d/dq$ предшествующего параграфа также обладают этим свойством.

Часто говорят, что функция *нормируема*, если она обладает ограниченной нормой. Мы будем применять этот термин также и к функциям с бесконечной нормой, если собственный дифференциал, образованный из этих функций, имеет конечную норму. Таким образом, собственные функции непрерывного спектра нормируемы (в указанном смысле), хотя они и не принадлежат пространству Гильберта.

Пользуясь соотношением (8) (которое имеет смысл только для квадратично интегрируемых Φ и Ψ), но применяя его не к собственным функциям как таковым, а к собственным дифференциалам, можно получить основные свойства непрерывного спектра и сопоставить их тем, которые были получены в § 5 для дискретного спектра:

1°. Всякое собственное значение $a(v)$ вещественно.

2°. Две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу. Это свойство ортогональности должно быть обобщением соотношения (III.42'). Неверно было бы писать

$$\langle \psi_v, \psi_{v'} \rangle = 0,$$

так как скалярное произведение $\langle \psi_v, \psi_{v'} \rangle$, вообще говоря, расходится. Однако имеем

$$\left\langle \psi_v, \frac{1}{\sqrt{\Delta v'}} \int_{v'}^{v'+\Delta v'} \psi_{v''} dv'' \right\rangle = 0,$$

если v находится вне интервала $(v', v' + dv')$. Доказательство не трудно, и мы предоставляем его читателю.

Если собственные значения непрерывного спектра невырождены, всегда можно нормировать функции так, чтобы

$$\langle \psi_v, \psi_{v'} \rangle = \delta(v - v').$$

Случай вырожденных собственных значений также не представляет существенных трудностей. Ограничимся формулировкой результатов. Каждому собственному значению принадлежит в зависимости от характера вырождения либо конечное, либо бесконечное (счетное или континуальное) множество линейно независимых собственных функций. Эти функции можно снаб-

дить либо индексом, принимающим конечное число значений, либо одним или несколькими индексами, принимающими бесконечное число дискретных значений, либо одним или несколькими индексами, изменяющимися непрерывно, либо даже некоторым числом дискретных индексов и некоторым числом непрерывных. Предположим для определенности, что необходимо использовать один дискретный индекс r и один индекс ρ , меняющийся непрерывно.

Всегда можно сделать так, чтобы собственные функции $\varphi^{(r)}(\nu, \rho)$ были ортонормированными в обобщенном смысле:

$$\langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \varphi^{(r')}(\nu', \rho') \rangle = \delta_{rr'} \delta(\rho - \rho') \delta(\nu - \nu'). \quad (33)$$

Будучи присоединены к ортонормированным собственным функциям дискретного спектра $\varphi_n^{(r)}$, они вместе образуют ортонормированную систему собственных функций эрмитового оператора A ; всякая собственная функция оператора A может быть представлена как линейная комбинация функций этой системы.

Предположим, что некоторая волновая функция Ψ представима в виде ряда по этим функциям, т. е.

$$\Psi = \sum_{n, r} c_n^{(r)} \varphi_n^{(r)} + \sum_r \int \gamma^{(r)}(\nu, \rho) \varphi^{(r)}(\nu, \rho) d\nu d\rho. \quad (34)$$

Коэффициенты при каждой функции в этом разложении получаются при умножении (скалярном) обеих частей равенства слева на соответствующую собственную функцию; учитывая соотношения ортонормированности, получаем

$$c_n^{(r)} = \langle \varphi_n^{(r)}, \Psi \rangle, \quad (35a)$$

$$\gamma^{(r)}(\nu, \rho) = \langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \Psi \rangle. \quad (35b)$$

С помощью тех же соотношений получаем обобщенное равенство Парсеваля

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = \sum_{n, r} |c_n^{(r)}|^2 + \sum_r \int |\gamma^{(r)}(\nu, \rho)|^2 d\nu d\rho. \quad (36)$$

Если такое представление возможно для всех волновых функций (т. е. для всех квадратично интегрируемых функций), то говорят, что система $\{\varphi\}$ является *полной ортонормированной системой функций*.

Существует простой способ выразить тот факт, что ортонормированная система является полной: следует записать разложение (34) для функции

$$\delta(q - q') \equiv \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_R - q'_R).$$

Коэффициенты такого разложения получатся, если в выражениях (35) — (36) вместо функции $\Psi(q) \equiv \Psi(q_1, q_2, \dots, q_R)$ подставить $\delta(q - q')$. Тогда получается так называемое *соотношение замкнутости*

$$\delta(q - q') = \sum_{n, r} \varphi_n^{*(r)}(q') \varphi_n^{(r)}(q) + \sum_r \int \varphi^{*(r)}(v, \rho; q') \varphi^{(r)}(v, \rho; q) dv d\rho. \quad (37)$$

Присоединяя его к соотношениям ортонормированности:

$$\langle \varphi_n^{(r)}, \varphi_{n'}^{(r')} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{rr'}, \quad (38a)$$

$$\langle \varphi_n^{(r)}, \varphi^{(r')}(v, \rho) \rangle = 0, \quad (38b)$$

$$\langle \varphi^{(r)}(v, \rho), \varphi^{(r')}(v', \rho') \rangle = \delta_{rr'} \delta(\rho - \rho') \delta(v - v'), \quad (38в)$$

получаем совокупность условий, необходимых и достаточных для того, чтобы система $\{\varphi\}$ была ортонормированной и полной.

Разложение (34) с правильными значениями коэффициентов (35) получается, если записать

$$\Psi(q) = \int \delta(q - q') \Psi(q') d\tau,$$

а затем вместо δ -функции подставить разложение (37).

Заметим, что полная ортонормированная система, если она существует, не является единственной. Действительно, можно как и в случае полностью дискретного спектра:

1°. Произвольно изменять фазу каждой из собственных функций.

2°. Выбирать бесконечным числом различных способов совокупность ортонормированных функций, принадлежащих одному вырожденному собственному значению.

3°. Кроме того, существует произвол в нормировке собственных функций непрерывного спектра. Действительно можно заменить каждый непрерывный индекс v на индекс $\mu \equiv \mu(v)$, где $\mu(v)$ есть произвольная непрерывная дифференцируемая монотонная функция v . Условие нормировки (38в) при этом заменяется аналогичным условием, в которое входит индекс μ ; оно будет удовлетворено, если в качестве новой собственной функции взять функцию

$$\varphi^{(r)}(\mu, \rho; q) = \left| \frac{d\mu}{dv} \right|^{-1/2} \varphi^{(r)}(v, \rho; q). \quad (39)$$

Не все эрмитовы операторы обладают полной ортонормированной системой собственных функций⁸⁾. Однако эрмитовы операторы, представляющие физические величины, такой системой обладают: по этой причине мы будем называть такие операторы *наблюдаемыми*. Доказательство того факта, что некоторый эрмитов оператор есть наблюдаемая, является обычно сложной математической задачей. Она была решена в ряде случаев для таких операторов как операторы положения и импульса, гамильтониан системы в одном измерении, оператор момента импульса и т. д. Это свойство столь тесно связано с физической интерпретацией указанных операторов, что в случае его невыполнения потребовалась бы ревизия основ формализма теории. Мы будем предполагать, что оно всегда выполняется.

§ 10. Статистическое распределение результатов измерения в общем случае

Предположим, что A — наблюдаемая. Ввиду того, что разложение (34) существует для любой квадратично интегрируемой функции Ψ , можно (при условии сходимости) определить действие на функцию Ψ оператора вида $F(A)$.

Для сокращения обозначений будем предполагать, что спектр A не имеет вырождения. Тогда

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n + \int \gamma(v) \varphi(v) dv. \quad (40)$$

Можно показать, что необходимым и достаточным условием сходимости разложения в правой части является сходимость ряда $\sum_n |c_n|^2$ и интеграла $\int |\gamma(v)|^2 dv$.

В общем случае

$$F(A) \Psi = \sum_n c_n F(a_n) \varphi_n + \int \gamma(v) F(a_v) \varphi(v) dv;$$

⁸⁾ Рассмотрим оператор id/dx , действующий на квадратично интегрируемые функции $\psi(x)$, определенные на полуоси $(0, +\infty)$. Этот оператор эрмитов, если его применять к функциям, обращающимся в нуль при $x=0$. Действительно, при этом условии имеем

$$\int_0^{\infty} \psi_1^* i \frac{d\psi_2}{dx} dx - \int_0^{\infty} \left(i \frac{d\psi_1}{dx} \right)^* \psi_2 dx = i \psi_1^* \psi_2 \Big|_0^{\infty} = 0.$$

Тем не менее, оператор не имеет собственных функций. Единственно возможными собственными функциями являются функции вида e^{-ikx} (k — собственное значение), но эти функции не обращаются в нуль при $x=0$.

это определение имеет смысл, если

$$\sum_n |c_n|^2 |F(a_n)|^2 \text{ и } \int |\gamma(v)|^2 |F(a_v)|^2 dv$$

сходятся. В частности, действие оператора $e^{i\xi A}$ всегда определено, так как выражение

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_n c_n e^{i\xi a_n} \varphi_n + \int \gamma(v) e^{i\xi a_v} \varphi(v) dv \quad (41)$$

сходится всегда.

Чтобы определить характеристическую функцию распределения A , применим соотношение

$$\langle \Psi, e^{i\xi A} \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n} + \int |\gamma(v)|^2 e^{i\xi a_v} dv,$$

полученное при использовании разложений (40) и (41) и условий ортонормированности. Характеристическая функция $f(\xi)$ принимает форму

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \sum_n w_n e^{i\xi a_n} + \int \omega(v) e^{i\xi a_v} dv,$$

где

$$w_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \quad \omega(v) = \frac{|\gamma(v)|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (42)$$

Из вида характеристической функции (сноска ⁶) следует, что:

1°. единственными значениями, которые может принимать величина $\mathcal{A}$, являются собственные значения сопоставленного этой величине оператора A ;

2°. вероятность того, что $\mathcal{A}$ принимает значение a_n , равна w_n ;

3°. вероятность того, что $\mathcal{A}$ принимает значение из непрерывного спектра, заключенное в интервале $[a(v), a(v+dv)]$, равна $\omega(v) dv$.

Сумма всех этих вероятностей $\sum w_n + \int \omega(v) dv$ равна единице (равенство Парсеваля). Находим также, что среднее значение A , если оно существует, выражается формулой $\langle \Psi, A \Psi \rangle / \langle \Psi, \Psi \rangle$ в согласии с основным постулатом.

В случае вырожденного спектра получаются те же результаты, но следует несколько изменить определение величин w_n и $\omega(v)$. Так, при замене разложения (40) на разложение (34),

мы должны взять

$$\omega_n = \frac{\sum_r |c_n^{(r)}|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \quad (43)$$

$$\omega(v) = \frac{\sum_r \int d\rho |\gamma^{(r)}(v, \rho)|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \quad (44)$$

В этих выражениях в явном виде присутствует некоторая система собственных функций оператора A . Существует большой произвол в выборе такой системы функций. Очевидно, однако, что закон распределения вероятностей и его характеристическая функция не зависят от этого выбора. Это свойство легко проверить непосредственно на выражениях (43) и (44) (задача 5).

§ 11. Другие методы исследования непрерывного спектра

Большим преимуществом развитого выше подхода к проблеме непрерывного спектра является его формальная простота. Это преимущество компенсирует недостаток математической строгости, возникающий при использовании δ -функции. Впрочем, все операции, производимые с δ -функцией, могут быть строго обоснованы на основе теории обобщенных функций (см. Дополнение А).

Тем не менее, следует иметь в виду, что трудности, возникающие при трактовке непрерывного спектра собственных значений, могут быть преодолены и на основе классических математических приемов. Вместо того, чтобы основываться на проблеме собственных значений и вводить там, где это необходимо, собственные функции, не принадлежащие пространству Гильберта, можно, следуя Нейману, рассматривать задачу строго, не выходя за пределы пространства Гильберта. Метод состоит в использовании так называемого разложения единицы в пространстве Гильберта, причем показывается, что каждой наблюдаемой волновой механики соответствует свое разложение единицы. Это рассмотрение строго эквивалентно по своим результатам приведенному выше. Мы упоминаем о нем только для полноты изложения⁹⁾.

Другой способ рассмотрения проблем, относящихся к непрерывному спектру, состоит в замене задачи на собственные значения (9) другой задачей, в которой последовательность соб-

⁹⁾ Читатель, интересующийся математическими аспектами квантовой теории, найдет их исчерпывающее изложение в книге И. фон Неймана (см. сноску³⁾).

ственных значений всюду дискретна, причем первоначальная задача получается как предельный случай при соответствующей модификации условий. Хотя подобная процедура не может претендовать на строгость, она имеет достоинство простоты и интуитивной ясности. Рассмотрим на основании этого метода операторы q и $-i\hbar d/dq$. Читатель может сравнить ход рассуждений и результаты с содержанием § 8.

Чтобы подойти к проблеме измерения положения в пространстве, разделим интервал $(-\infty, +\infty)$ на равные сегменты длины η и заменим волновые функции $\psi(q)$ приближенными волновыми функциями $\psi^\times(q)$, постоянными на каждом сегменте и определяемыми соотношением

$$\psi^\times(q) = \psi(n_q, \eta),$$

где n_q обозначает наибольшее целое число, содержащееся в q/η , иначе говоря: $q - \eta < n_q\eta \leq q$. Аналогичным образом заменим оператор q оператором $q^\times$ умножение на $n_q\eta$. В пределе, когда $\eta \rightarrow 0$, имеем $q^\times \rightarrow q$ и $\psi^\times(q) \rightarrow \psi(q)$.

* Множество функций $\psi^\times$ образует пространство Гильберта, в котором оператор $q^\times$ вполне определен и обладает дискретным спектром собственных значений $n\eta$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm\infty$). Каждому собственному значению $n\eta$ принадлежит собственная функция u_n , нормированная на единицу

$$u_n = \begin{cases} \eta^{-1/2}, & \text{если } n\eta \leq q < (n+1)\eta, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Собственные функции ортонормированы: $\langle u_n, u_n \rangle = \delta_{nn}$. Кроме того, они образуют полную систему, ибо всякая функция $\psi^\times$ может быть представлена разложением в ряд по u_n :

$$\psi^\times = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \eta^{1/2} \psi(n\eta) u_n. \quad (45)$$

Следовательно, можно применить теорию §§ 5, 6 с тем результатом, что вероятность измерить значение $q^\times = n\eta$ равна $\eta |\psi(n\eta)|^2$. В пределе $\eta \rightarrow 0$ промежутки между соседними собственными значениями стремятся к нулю, спектр становится непрерывным. Измерение отличной от нуля координаты $q' = n\eta$ соответствует бесконечно большому значению n ; однако вероятность обнаружить это точное значение координаты пропорциональна η и следовательно стремится к нулю. В действительности эта вероятность не интересна, поскольку спектр значений координаты непрерывен. Нам важно знать вероятность $P(q')\delta q'$, найти частицу в интервале $(q', q' + \delta q')$, т. е.

$$P(q')\delta q' = \sum (q', q' + \delta q') \eta |\psi(n\eta)|^2,$$

где суммирование распространено на все те n , при которых $n\eta$ находится в интервале $(q', q' + \delta q')$. Поскольку $\delta q'$ является малой постоянной, члены этой суммы числом $\delta q'/\eta$ все примерно равны $\eta |\psi(q')|^2$. Следовательно, в пределе $\eta \rightarrow 0$ имеем

$$P(q')\delta q' = |\psi(q')|^2 \delta q'.$$

Заметим, что разложение (45) может быть записано еще и в виде

$$\psi^\times = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi(n\eta) \frac{u_n}{\sqrt{\eta}} \cdot \eta = \sum_{q'} \psi(q') v_\eta(q') \cdot \eta,$$

где сумма по q' обозначает суммирование по дискретной последовательности значений $q' = n\eta$, а

$$v_{\eta}(q') = \eta^{-1/2} u_n = \begin{cases} \eta^{-1}, & \text{если } q - \eta < q' \leq q, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

При $\eta \rightarrow 0$ данный ряд переходит в интеграл от произведения $\psi(q')$ на предел функции $v_{\eta}(q')$, но этот предел как раз равен $\delta(q' - q)$. Мы приходим, следовательно, к формуле (32).

Аналогичный подход в случае измерения импульса состоит в том, что мы первоначально ограничиваем область изменения координаты q интервалом $(-L/2, +L/2)$, где L на завершающем этапе рассуждений будем стремить к бесконечности. Для того чтобы оператор $p = -i\hbar d/dq$ был эрмитовым в этой конечной области, следует наложить на функции $\psi(q)$ из функционального пространства, где действует оператор, некоторые граничные условия. Условие эрмитовости записывается в виде

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dq} dq - \int_{-L/2}^{+L/2} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dq} \right)^* \psi dq = \frac{\hbar}{i} \psi^* \psi \Big|_{-L/2}^{+L/2} = 0$$

для любых функций $\phi(q)$ и $\psi(q)$, т. е. $\frac{\psi(L/2)}{\psi(-L/2)} = \frac{\psi^*(-L/2)}{\psi^*(L/2)}$ равно постоянной, не зависящей от ψ и ϕ .

Другими словами, требуется, чтобы для всякой функции $\psi(q)$

$$\psi(L/2) = e^{i\alpha} \psi(-L/2),$$

где $e^{i\alpha}$ — некоторый фиксированный фазовый множитель. Условимся принимать его равным единице, что дает *условие периодичности*

$$\psi(L/2) = \psi(-L/2).$$

В этих условиях задача о собственных значениях оператора $-i\hbar d/dq$ решается без труда. Спектр собственных значений оказывается дискретным:

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty).$$

Собственному значению p_n соответствует нормированная на единицу собственная функция

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p_n q}.$$

Функции u_n взаимно ортогональны, кроме того, они образуют полную систему, так как согласно теории рядов Фурье всякая

квадратично интегрируемая функция $\psi(q)$ в интервале $(-L/2, +L/2)$ может быть представлена в виде ряда

$$\psi(q) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n u_n; \quad (46)$$

при этом

$$c_n = \langle u_n, \psi(q) \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \int_{-L/2}^{+L/2} e^{-\frac{i}{\hbar} p_n q} \psi(q) dq.$$

Мы можем, следовательно, применить теорию §§ 5, 6 и найдем, что вероятность найти $p = p_n$ равна $|c_n|^2$.

В пределе $L \rightarrow \infty$ промежутки $\varepsilon = 2\pi\hbar/L$, разделяющий соседние собственные значения, стремится к нулю, и спектр собственных значений импульса $p_n = n\varepsilon$ становится непрерывным. Исследование перехода к пределу проводится совершенно аналогично тому, как это было сделано для q . При $\varepsilon \rightarrow 0$, при условии, что $p' = n\varepsilon$ остается постоянным, $\varepsilon^{-1/2} c_n$ стремится к образу Фурье

$$\varphi(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p' q} \psi(q) dq.$$

Мы оставляем читателю возможность самому найти после предельного перехода статистическое распределение результатов измерения импульса и показать, что представление $\psi(q)$ в виде ряда Фурье (46) переходит в интегральное представление Фурье

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p') u(p'; q) dp',$$

где $u(p'; q)$ есть предельная форма $\varepsilon^{-1/2} u_n$, т. е.

$$u(p'; q) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p' q}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

§ 12. Комментарии и примеры

Мы показали, что статистическое распределение результатов измерения динамической переменной полностью определяется заданием волновой функции физической системы. Этот результат был получен в самом общем виде. Каждой динамической переменной сопоставляется наблюдаемая A , т. е. эрмитов (самосопряженный) оператор, обладающий полной ортонормированной системой собственных функций. Отправляясь от естественного и формально очень простого постулата, касающегося

средних значений, мы показали, что единственно возможными результатами измерений являются собственные значения наблюдаемой A , а искомый закон распределения вероятностей непосредственно выражается через квадраты модулей коэффициентов разложения волновой функции по собственным функциям.

Среди наиболее часто встречающихся динамических переменных, помимо пространственных координат и импульса, следует упомянуть энергию, представляемую гамильтонианом Шредингера, и момент импульса.

Спектр энергии может быть в зависимости от физической ситуации дискретным (см. § III. 5), непрерывным (см. § III. 3) или смешанным (см. § III. 6). Проблема собственных значений гамильтониана H имеет важное значение в квантовой теории не только в связи с определением энергии, но и потому, что она играет определяющую роль при решении уравнения Шредингера. Если H не зависит от времени, а это единственный случай, когда понятие энергии имеет действительный смысл, волновая функция $\Psi(t)$ в момент времени t получается из волновой функции $\Psi(t_0)$ в начальный момент t_0 с помощью преобразования

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \Psi(t_0).$$

Мы можем вычислить выражение в правой части равенства, используя разложение $\Psi(t_0)$ в ряде по собственным функциям H (частный случай уравнения (41)); нетрудно установить, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = -\frac{i}{\hbar} H e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \Psi(t_0) = -\frac{i}{\hbar} H \Psi(t),$$

т. е. что $\Psi(t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера, а также начальному условию при $t = t_0$.

Предположим, в целях упрощения записи, что спектр H является полностью дискретным и невырожденным; пусть E_n ($n = 1, 2, \dots$) собственные значения оператора H , а ψ_n — собственные функции, принадлежащие E_n . Разложение $\Psi(t_0)$ запишется в виде

$$\Psi(t_0) = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = \langle \psi_n, \Psi(t_0) \rangle.$$

Тогда функция $\Psi(t)$ представляется рядом

$$\Psi(t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} \psi_n. \quad (47)$$

Заметим, что модуль коэффициента при ψ_n в этом разложении не зависит от t . Отсюда получается важное свойство: *статисти-*

ческое распределение энергии физической системы (гамильтониан которой не зависит от времени) постоянно во времени.

Момент импульса частицы в классической механике выражается вектором $[rp]$. В квантовой теории ему сопоставляется векторный оператор

$$l \equiv -i\hbar [r\nabla]. \quad (48)$$

Выпишем явно одну из его компонент

$$l_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Выберем Oz в качестве полярной оси и обозначим через (r, θ, φ) сферические координаты частицы; нетрудно проверить, что $\partial/\partial\varphi = x\partial/\partial y - y\partial/\partial x$. Следовательно,

$$l_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}. \quad (49)$$

Задача нахождения собственных значений упрощается, если искать волновую функцию в сферических координатах:

$$l_z \psi(r, \theta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = l'_z \psi(r, \theta, \varphi).$$

Тогда находим

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r, \theta) e^{\frac{i}{\hbar} l'_z \varphi},$$

где $F(r, \theta)$ — некоторая функция r и θ . Чтобы собственная функция была однозначной, необходимо, чтобы она была периодичной по φ с периодом 2π , т. е.

$$l'_z = m\hbar \quad (m — \text{целое}). \quad (50)$$

Следовательно, спектр собственных значений компоненты момента импульса частицы является полностью дискретным. Этот результат без труда распространяется на компоненту полного момента импульса системы частиц в согласии с экспериментальными данными по пространственному квантованию.

Раздел IV. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

§ 13. Операция измерения и редукция волнового пакета. Идеальные измерения

Статистические распределения, полученные в предшествующих разделах, могут быть подвергнуты непосредственной экспериментальной проверке. Так, распределение, сопоставляемое некоторой динамической переменной $\mathcal{A}$, есть распределение результатов, полученных при измерении $\mathcal{A}$ на очень большом числе $\mathcal{N}$ тождественных систем, независимых друг от друга и находящихся в момент измерения в одном и том же динами-

ческом состоянии. Каждая система в этот момент времени ¹⁰⁾ представляется одной и той же функцией Ψ (определяемой с точностью до постоянного множителя), которой соответствует вполне определенное теоретическое распределение. Это распределение можно сравнить с экспериментальным.

Для полноты физического истолкования теории остается уточнить:

1) каким образом предшествующие измерения системы позволяют установить ее динамическое состояние и, в частности, как убедиться в том, что все $\mathcal{N}$ систем, упомянутые выше, действительно находятся в динамическом состоянии, представляемом Ψ ;

2) что происходит с каждой из систем ансамбля после осуществления измерения.

Эти два вопроса тесно связаны между собой. Рассмотрим сначала второй из них.

После окончания измерения ¹¹⁾ система может вновь рассматриваться как независимый объект, полностью отделенный от измерительного прибора, вновь становится возможным описание физической системы с помощью ее волновой функции. Волновая функция системы после измерения несомненно отличается от той волновой функции, которая описывала систему в момент времени непосредственно перед измерением, кроме, может быть, того случая, когда волновая функция перед измерением была собственной функцией наблюдаемой A , сопоставленной измеряемой физической величине. Это (не каузальное) изменение волновой функции при осуществлении измерения часто называют *редукцией волнового пакета*.

Мы знаем, что некаузальное изменение волновой функции возникает вследствие неконтролируемого возмущения эволюции системы при взаимодействии с измерительным прибором, причем основной эффект возмущения состоит в том, что значение переменной, дополнительной к измеряемой переменной, становится тем менее определенным, чем точнее было проведено измерение.

Важно отличать это неконтролируемое возмущение от всех других модификаций физической системы в процессе измерения, которые в принципе могут быть точно вычислены. Часто бывает, например, что сама измеряемая величина изменяется в про-

¹⁰⁾ Момент времени, о котором идет речь, это *момент начала измерения*. Как только измерение началось, система находится во взаимодействии с измерительным прибором и описание ее эволюции с помощью только волновой функции системы становится невозможным.

¹¹⁾ Детальное исследование самого механизма измерения находится вне рамок данной книги. См. в этой связи литературу, цитируемую в гл. IV, сноска ¹⁰.

цессе измерения. Примером такой ситуации могут служить два способа измерения импульса, которые были разобраны в гл. IV. Модификация измеряемой величины зависит, конечно, от устройства используемого измерительного прибора. Так, при измерении импульса при комптоновском рассеянии, рассмотренном на стр. 148, разность $p' - p$ тем меньше, чем меньше частота ν фотона, и стремится к нулю при $\nu \rightarrow 0$. Нельзя поэтому дать общего рецепта, касающегося модификации динамического состояния системы в процессе измерения, ибо эта модификация зависит каждый раз от конкретных условий опыта. Однако можно представить себе идеальные условия опыта, при которых все упомянутые выше контролируемые модификации строго компенсированы и проявляются только неконтролируемые модификации, характерные для квантовых явлений. Мы примем, что такие *идеальные измерения* действительно возможны или что их можно рассматривать как идеальные предельные случаи реальных измерений (например, измерения положения частицы в пределе бесконечно малой длительности измерения, обсуждавшиеся в гл. IV, или измерения импульса при рассеянии Комптона, когда $\nu \rightarrow 0$).

Рассмотрим теперь идеальное измерение величины $\mathcal{A}$ и предположим сначала, что найденное в результате измерения значение a_i есть невырожденное собственное значение. Согласно предположению мы достоверно знаем, что по окончании измерения $\mathcal{A} = a_i$, т. е. что волновая функция системы (с точностью до произвольной постоянной) ψ_i — собственная функция, принадлежащая собственному значению a_i . Произвольная постоянная не имеет никакого физического смысла, ибо какими бы ни были предшествующие наблюдения системы, статистическое распределение результатов этих наблюдений не зависит от выбора постоянной. Таким образом, волновая функция системы после измерения точно известна. Измерительный аппарат действует в некотором смысле как «идеальный фильтр». Волновая функция до измерения есть функция $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$. Имеется вероятность $|c_i|^2$ найти в результате измерения величину a_i ; действие операции измерения сводится к «пропусканию» без изменения единственного члена $c_i \psi_i$ в разложении Ψ по собственным функциям оператора A .

В более общем случае, когда собственные значения наблюдаемой A и, в частности, значение a_i вырождены, волновая функция до измерения (по предположению нормированная на единицу) может быть представлена в форме (ср. уравнение (20)):

$$\Psi = \sum_p \Psi_p, \quad \Psi_p = \sum_r c_p^{(r)} \psi_p^{(r)}. \quad (51)$$

Вероятность получить при измерении величину a_i равна $\langle \Psi_i, \Psi_i \rangle = \sum_r |c_r^{(i)}|^2$. В случае идеального измерения волновая функция после измерения есть собственная функция оператора A , принадлежащая собственному значению a_i : это линейная комбинация функций $\psi_r^{(i)}$ (r — переменный индекс). Информация, содержащаяся в факте обнаружения значения a_i , недостаточна для определения указанной линейной комбинации, причем неопределенность тем больше, чем больше кратность вырождения собственного значения. При идеальном измерении измерительный прибор действует как «идеальный фильтр», «пропускающий» без искажения только часть разложения (51) функции Ψ , относящуюся к собственному значению a_i , т. е. функцию

$$\Psi_i = \sum_r c_r^{(i)} \psi_r^{(i)}.$$

Если измерение неидеально, то «прохождение» этих членов сопровождается некоторым искажением; это искажение в принципе может быть вычислено и зависит от конкретного устройства измерительного прибора.

Далее в этой главе мы будем предполагать, что все измерения, о которых идет речь, являются идеальными. Это сильно упрощает рассуждения. Такое предположение не ограничивает общности и не приводит к фундаментальным изменениям физического истолкования теории.

§ 14. Коммутирующие наблюдаемые и совместные переменные

Рассмотрим две наблюдаемые A и B . Предположим, что спектр их собственных значений полностью дискретный, хотя те свойства, которые мы изучим, справедливы и в общем случае. Пусть эти наблюдаемые имеют одну общую собственную функцию Ψ_0 :

$$\begin{aligned} A\Psi_0 &= a\Psi_0, \\ B\Psi_0 &= b\Psi_0. \end{aligned}$$

Физический смысл этих двух уравнений следующий. Если физическая система в данный момент времени находится в состоянии Ψ_0 , то точное измерение величин $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ с достоверностью приведет к значениям a и b , соответственно. Необходимым условием того, что эти уравнения удовлетворяются одновременно, является равенство

$$(AB - BA) \Psi_0 = [A, B] \Psi_0 = 0, \quad (52)$$

т. е. коммутатор A и B имеет собственной функцией Ψ_0 , принадлежащую собственному значению 0.

В качестве примера величин, для которых это условие не выполняется, могут служить наблюдаемые x и p_x , так как их коммутатор является отличной от нуля постоянной. Именно (см. уравнение (II. 10)):

$$[x, p_x] = -i\hbar \left[x, \frac{\partial}{\partial x} \right] = i\hbar \neq 0; \quad (53)$$

действительно, мы хорошо знаем, что эти две величины никогда не могут быть одновременно точно измерены.

С другой стороны, уравнение (52) автоматически выполняется, когда наблюдаемые A и B коммутируют. В этом случае мы имеем важную теорему:

Если две наблюдаемые коммутируют, то они обладают общей полной ортонормированной системой собственных функций, и наоборот.

Физически это означает, что динамические переменные, представляемые этими двумя наблюдаемыми, могут быть одновременно точно измерены: это *совместные* переменные. В частности, можно одновременно произвести идеальное измерение переменных $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ и в этом случае волновая функция после измерения будет общей собственной функцией A и B .

Доказательство прямой теоремы таково. Предполагаем, что наблюдаемые A и B коммутируют

$$[A, B] = 0.$$

Пусть ψ_a есть собственная функция A , принадлежащая собственному значению a . Функция ψ_a может быть разложена по системе ортонормированных собственных функций наблюдаемой B , т. е. может быть представлена в форме

$$\psi_a = \sum_m \varphi(a; b_m),$$

где $\varphi(a; b_m)$ — собственная функция B , принадлежащая собственному значению b_m . Можно всегда сделать так, чтобы все функции, входящие в эту сумму, принадлежали различным собственным значениям (см. уравнение (20)). Покажем, что

$$\hat{F}_m \equiv (A - a)\varphi(a; b_m) = 0.$$

Поскольку A и B коммутируют

$$B\hat{F}_m = (A - a)B\varphi(a; b_m) = (A - a)b_m\varphi(a; b_m) = b_m\hat{F}_m.$$

Иными словами, функции $\hat{F}_m$ являются собственными функциями B , и ввиду того что собственные значения различны, эти функции линейно независимы. Однако имеем

$$\sum_m \hat{F}_m = (A - a)\psi_a = 0.$$

Это возможно только в том случае, если каждая из функций $\hat{\varphi}_m$ равна нулю. Следовательно, функции $\varphi(a; b_m)$ одновременно являются собственными функциями A и B .

Рассмотрим теперь полную ортонормированную систему $\{\psi_n^{(r)}\}$ собственных функций A

$$A\psi_n^{(r)} = a_n \psi_n^{(r)}.$$

По доказанному эти функции можно представить в форме

$$\psi_n^{(r)} = \sum_m \varphi^{(r)}(a_n, b_m); \quad (54)$$

где $\varphi^{(r)}(a_m; b_m)$ являются общими собственными функциями A и B . Совокупность функций $\varphi^{(r)}(a_n; b_m)$, соответствующих одной паре собственных значений a_n, b_m , может не быть линейно независимой, однако всегда можно тем или иным способом (например, с помощью процесса ортогонализации Шмидта) выбрать последовательность ортонормированных функций $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, соответствующих той же паре собственных значений, причем функции $\varphi^{(r)}(a_n; b_m)$ будут линейными комбинациями этих новых функций:

$$\varphi^{(r)}(a_n; b_m) = \sum_s c_{rs} \chi^{(s)}(a_n; b_m). \quad (55)$$

Множество $\{\chi\}$ всех функций χ образует ортонормированную систему собственных функций, общих для A и B . При этом полученная система полная, так как всякая волновая функция Ψ может быть разложена в ряд по функциям χ . Чтобы построить такое разложение следует разложить Ψ в ряд по функциям полной системы $\{\psi_n^{(r)}\}$, затем вместо функций $\psi_n^{(r)}$ подставить их выражения через $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, полученные с помощью уравнений (54) и (55), что и требовалось доказать.

Обратно, если A и B обладают общей полной ортонормированной системой собственных функций $\chi^{(s)}(a_n; b_m)$, то

$$AB\chi^{(s)}(a_n; b_m) = a_n b_m \chi^{(s)}(a_n, b_m) = BA\chi^{(s)}(a_n; b_m),$$

следовательно,

$$[A, B]\chi^{(s)}(a_n; b_m) = 0.$$

Действие коммутатора $[A, B]$ на любые функции из системы $\{\chi\}$ дает нуль. Но поскольку, по предположению, всякая волновая функция Ψ разлагается в ряд по функциям χ , имеем при любой Ψ : $[A, B]\Psi = 0$. Следовательно,

$$[A, B] = 0.$$

С помощью коммутирующих наблюдаемых A, B можно образовать новые наблюдаемые виды $f(A, B)$, где $f(x, y)$ — произ-

вольно выбранная функция. По определению действие наблюдаемой $f(A, B)$ на собственную функцию $\chi(a; b)$, общую для операторов A и B , дает

$$f(A, B)\chi(a; b) = f(a, b)\chi(a; b).$$

Действие новой наблюдаемой на произвольную функцию Ψ получается путем разложения Ψ в ряд по χ и применения оператора $f(A, B)$ к каждому члену разложения, если, конечно, получающийся ряд сходится; в противном случае функция $f(A, B)\Psi$ не существует. Из самого определения $f(A, B)$ очевидно, что эта наблюдаемая обладает общей с A и B полной ортонормированной системой собственных функций, а именно системой $\{\chi\}$. Отсюда следует, что $f(A, B)$ коммутирует с A и B .

Все эти результаты очевидно обобщаются на случай произвольного числа R попарно коммутирующих наблюдаемых. Если R наблюдаемых все попарно коммутируют, то они обладают (по крайней мере) одной общей полной ортонормированной системой собственных функций, и наоборот. Кроме того, любая (вещественная) функция этих наблюдаемых есть наблюдаемая, которая коммутирует с каждой из них и обладает общей с ними системой собственных функций.

§ 15. Полные наборы коммутирующих наблюдаемых

Рассмотрим наблюдаемую A . Из ее собственных функций можно образовать полную ортонормированную систему собственных функций; будем называть эту систему функций *базисной системой* наблюдаемой A . Базисная система, вообще говоря, не единственна. Степень произвола при ее выборе обсуждалась в § 9. Условимся считать тождественными две системы, составляющие функции которых отличаются только фазой и (в случае непрерывного спектра) нормировкой. При этом условии базисная система наблюдаемой A единственна, если все собственные значения невырождены. Чтобы исследовать другой случай, примем сначала, что собственное значение a дважды вырождено, и пусть ψ_1, ψ_2 суть две собственные ортонормированные функции, принадлежащие этому собственному значению. Нетрудно проверить, что функции

$$\varphi_1 = \psi_1 \cos \alpha + \psi_2 \sin \alpha,$$

$$\varphi_2 = -\psi_1 \sin \alpha + \psi_2 \cos \alpha$$

также будут ортонормированными, принадлежащими тому же собственному значению. Базисная система наблюдаемой A может быть образована как из функций (ψ_1, ψ_2) , так и из функций (φ_1, φ_2) . Следовательно, базисная система A не является единственной.

Пусть теперь имеется еще одна наблюдаемая B , коммутирующая с A . Может случиться, что общая базисная система A и B , существование которой мы доказали в § 14, будет единственной. Тогда говорят, что наблюдаемые A и B образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых.

Если A и B не обладают единственной общей базисной системой, мы вынуждены добавить к ним третью наблюдаемую C , коммутирующую с первыми двумя и т. д.

В общем случае говорят, что *наблюдаемые $A, B, \dots, L$ образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, если они обладают общей базисной системой и эта система единственна.* В этом случае любая наблюдаемая, коммутирующая с каждой наблюдаемой полного набора, по необходимости обладает той же базисной системой, поэтому ее собственные значения являются вполне определенными функциями собственных значений $a, b, \dots, l$ наблюдаемых $A, B, \dots, L$; иными словами, эта наблюдаемая может рассматриваться как функция наблюдаемых набора.

Динамические переменные, представляемые полным набором коммутирующих наблюдаемых, могут быть одновременно точно измерены и образуют *полный набор совместных переменных* (§ IV. 17). Если осуществить одновременное точное измерение значений этих переменных, то волновая функция системы будет собственной функцией наблюдаемых $A, B, \dots, L$, принадлежащей собственным значениям $a, b, \dots, l$, обнаруженным в результате измерения. *Поскольку существует только одна собственная функция, обладающая этим свойством, то выполнение этих измерений полностью определяет волновую функцию физической системы.* Говорят, что *динамическое состояние физической системы полностью определяется заданием квантовых чисел $a, b, \dots, l$.* В действительности, эта функция определяется только с точностью до постоянного множителя, но поскольку физически измеряемые величины, а именно статистические распределения результатов различных возможных измерений не зависят от выбора этой постоянной, можно придать ей любое значение, не меняя физической значимости волновой функции. Обычно волновую функцию нормируют на единицу, что оставляет произвольной постоянную фазу, не имеющую физического смысла.

Осуществление физического эксперимента можно описать следующим образом. В начальный момент времени t_0 мы «*приготовляем*» систему, выполняя одновременное измерение полного набора совместных переменных. Таким образом, динамическое состояние физической системы в начальный момент времени оказывается полностью определенным.

В дальнейшем волновая функция физической системы эволюционирует во времени, подчиняясь уравнению Шредингера. В каждый последующий момент времени динамическое состояние системы таким образом точно известно, по крайней мере до того момента, когда оно будет возмущено вмешательством измерительного прибора. Наконец, в некоторый момент времени t мы осуществляем данное измерение. Поскольку волновая функция $\Psi(t)$ в момент измерения известна, можно точно указать статистическое распределение результатов измерения. Повторяя опыт на очень большом числе N тождественных систем, мы получаем экспериментальное распределение, которое можно сравнить с теоретическим.

§ 16. Чистые и смешанные состояния

На практике полное «приготовление» системы, упомянутое выше, осуществляется редко. Чаще всего измеренные динамические переменные не составляют полного набора, и динамическое состояние системы известно не точно. В этих случаях прибегают к статистическим методам. Вместо строго заданного динамического состояния системы мы имеем статистическую смесь состояний. Не имея возможности описать состояние системы одной определенной волновой функцией, мы рассматриваем статистическую смесь волновых функций, причем каждая волновая функция входит со своим статистическим весом. Подобно классической статистической механике, существует *квантовая статистическая механика*.

Когда «приготовление» полное и, следовательно, динамическое состояние системы известно точно, говорят, что мы имеем дело с *чистым состоянием*, в противном случае говорят, о *смешанном состоянии*.

В предсказании результатов измерений при смешанном состоянии статистика играет двойную роль: с одной стороны она отражает наличие чисто квантовых неопределенностей, связанных с неконтролируемым возмущением системы в операции измерения, с другой стороны — учитывает неполноту информации о динамическом состоянии физической системы.

Предположим, что в момент «приготовления» системы t_0 она может быть описана совокупностью волновых функций $\Psi^{(1)}(t_0), \dots, \Psi^{(k)}(t_0), \dots$ со статистическими весами $p_1, \dots, \dots, p_k, \dots$ ($\sum_k p_k = 1$). Пусть $\Psi^{(1)}(t), \dots, \Psi^{(k)}(t), \dots$ решения уравнения Шредингера, соответствующие начальным значениям $\Psi^{(1)}(t_0), \dots, \Psi^{(k)}(t_0), \dots$. В момент времени t система представляется ансамблем этих функций $\Psi^{(1)}(t), \dots, \dots, \Psi^{(k)}(t), \dots$ с теми же статистическими весами $p_1, \dots$

..., p_k , ... Пусть $\langle A \rangle_k$ есть среднее значение результатов измерения некоторой величины $\mathcal{A}$ в том случае, когда система находится в динамическом состоянии $\Psi^{(k)}(t)$:

$$\langle A \rangle_k = \frac{\langle \Psi^{(k)}(t), A \Psi^{(k)}(t) \rangle}{\langle \Psi^{(k)}(t), \Psi^{(k)}(t) \rangle}.$$

Тогда среднее значение результатов измерения $\mathcal{A}$ при статистической смеси состояний в момент времени t дается формулой

$$\langle A \rangle = \sum_k p_k \langle A \rangle_k.$$

Аналогично, если $w_i^{(k)}$ есть вероятность получить результат a_i , когда динамическое состояние системы представляется функцией $\Psi^{(k)}(t)$, то вероятность найти этот результат при измерении на смеси равна

$$w_i = \sum_k p_k w_i^{(k)}. \quad (56)$$

Важнейший пример квантостатистического смешанного состояния дает система, находящаяся в термодинамическом равновесии с термостатом при температуре T . Здесь возможными динамическими состояниями являются собственные состояния гамильтониана H системы, статистический вес данного собственного состояния зависит исключительно от соответствующего ему собственного значения H и равен с точностью до нормировочной постоянной фактору Больцмана $e^{-E/kT}$, где E — собственное значение H , а k — постоянная Больцмана.

Раздел V. АЛГЕБРА КОММУТАТОРОВ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

§ 17. Алгебра коммутаторов и основные свойства коммутаторов

Пока мы оперируем с коммутирующими наблюдаемыми, можно без ограничений пользоваться правилами обычной алгебры. Однако не все наблюдаемые заданной квантовой системы обладают свойством коммутировать друг с другом. Например, наблюдаемые квантовой системы размерности R являются некоторыми функциями наблюдаемых положения q_i ($i = 1, 2, \dots, R$) и наблюдаемых импульса p_i ($i = 1, 2, \dots, R$)¹²), т. е. наблюдаемых, не коммутирующих между собой. Коммутаторы q и p играют фундаментальную роль в теории. Они имеют

¹²) Это верно постольку, поскольку квантовая система имеет классический аналог. В дальнейшем мы введем дополнительные переменные типа спина, которые не имеют классического аналога.

ВИД

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad (57)$$

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (58)$$

Соотношения (57) очевидны, при этом второе следует из того факта, что операции дифференцирования переставимы. Соотношение (58) есть обобщение (53), причем подразумевается

$$p_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Ввиду того, что q и p не коммутируют, определение динамической переменной $\mathcal{A} = A(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ требует указания порядка расположения q и p при явном выражении функции $A(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$. На практике A обычно выражается в виде полинома от p или бесконечного ряда по степеням p , коэффициенты которого суть функции q . Каждый член имеет вид произведения компонент p_i и функций от q , расположенных в определенном порядке. Функция A , рассматриваемая как оператор, вполне определена только тогда, когда точно указан порядок операторов в каждом члене разложения. Важно установить, какой вид имеют коммутаторы q и p с заданной операторной функцией A . Если мы имеем дело с функциями только от q или только от p , то нетрудно получить соотношения:

$$[q_i, F(q_1, \dots, q_R)] = 0; \quad (59)$$

$$[p_i, G(p_1, \dots, p_R)] = 0; \quad (60)$$

$$[p_i, F(q_1, \dots, q_R)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial q_i}; \quad (61)$$

$$[q_i, G(p_1, \dots, p_R)] = +i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i}. \quad (62)$$

Соотношения (59) и (60) являются частными случаями общего правила, установленного в конце § 14. Чтобы доказать равенство (61), необходимо выписать оператор p_i в явном виде и проверить действие левой и правой частей равенства на некоторую волновую функцию (см. уравнение (II.9)). Уравнение (62) допускает ту же проверку, но в пространстве импульсов; напомним, что если $\Phi(p_1, \dots, p_R)$ есть волновая функция в пространстве импульсов, соответствующая $\Psi(q_1, \dots, q_R)$, то функция в пространстве импульсов, соответствующая $q_i\Psi(q_1, \dots, q_R)$, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \Phi(p_1, \dots, p_R).$$

Тот же результат можно получить, воспользовавшись правилами алгебры коммутаторов. Приведем здесь четыре основных

правила. Они следуют из определения коммутаторов, и читатель без труда может проверить их непосредственным вычислением. Пусть A, B, C — некоторые линейные операторы. Тогда имеем:

$$[A, B] = -[B, A]; \quad (63)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]; \quad (64)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]; \quad (65)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \quad (66)$$

Повторным применением правила (65) получим также

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}.$$

В частности, для системы в одном измерении имеем

$$[q, p^n] = n\hbar p^{n-1}.$$

Соотношение (62) доказано, таким образом, если G представляет собой многочлен от p , но согласно формуле (64) оно доказано и для случая, когда G выражается полиномом или, в общем случае, сходящимся рядом по степеням p .

Для произвольных функций от q и p можно написать

$$[p_i, A] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q_i}, \quad (67)$$

$$[q_i, A] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}, \quad (68)$$

где правые части получаются формальным дифференцированием функции A , причем подразумевается, что порядок операторов p и q при явном выражении функции A выбран правильно.

Проиллюстрируем это на примере квантовой системы в одном измерении. Пусть $f(q)$ есть некоторая функция q . Коммутаторы q и каждой из функций $p^2 f(q)$, $p f(q)p$, $f(q)p^2$ могут быть получены дифференцированием по p этих функций, однако это будут различные операторы. Действительно, повторным применением правила (62) находим:

$$[q, p^2 f(q)] = 2i\hbar p f(q);$$

$$[q, p f p] = i\hbar (f p + p f);$$

$$[q, f p^2] = 2i\hbar f p.$$

Аналогичным образом

$$[p, p^2 f] = -i\hbar p^2 f';$$

$$[p, p f p] = -i\hbar p f' p;$$

$$[p, f p^2] = -i\hbar f' p^2.$$

§ 18. Соотношения коммутации для момента импульса

В качестве приложения правил (63)—(65) алгебры коммутаторов вычислим коммутаторы составляющих момента импульса частицы:

$$l \equiv [rp].$$

Имеем:

$$\begin{aligned} [l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \end{aligned} \quad \text{правило (64)}$$

$$= y[p_z, z]p_x + p_y[z, p_z]x \quad \text{правило (65)}$$

$$= i\hbar(xp_y - yp_x)$$

$$= i\hbar l_z.$$

Два других коммутатора могут быть получены циклической перестановкой. Получаем

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z, \quad [l_y, l_z] = i\hbar l_x, \quad [l_z, l_x] = i\hbar l_y. \quad (69)$$

Три компоненты момента импульса частицы не коммутируют друг с другом. Не существует полной ортонормированной системы собственных функций, общей для какой-нибудь пары компонент. Другими словами, две компоненты момента импульса в общем случае¹³⁾ не могут быть одновременно точно определены.

Заметим, с другой стороны, что (правило (65))

$$[l_z, l_x^2] = i\hbar(l_y l_x + l_x l_y);$$

$$[l_z, l_y^2] = -i\hbar(l_y l_x + l_x l_y);$$

$$[l_z, l_z^2] = 0.$$

Складывая эти равенства, имеем (правило (64))

$$[l_z, l^2] = 0, \quad (70)$$

где оператор

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \quad (71)$$

есть квадрат длины вектора l .

Операторы l^2 и l_z коммутируют; следовательно, они могут быть одновременно точно определены. Пары (l^2, l_x) и (l^2, l_y) обладают тем же свойством.

¹³⁾ Слова «в общем случае» имеют важное значение. Три компоненты не имеют общей базисной системы, но обладают общими собственными функциями, теми для которых $l_x = l_y = l_z = 0$; эти функции зависят только от модуля радиуса-вектора точки $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, но не от его направления.

§ 19. Изменение статистического распределения во времени. Интегралы движения

Запишем уравнение Шредингера вместе с комплексно сопряженным уравнением:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -(H\Psi)^*.$$

Если Ψ нормирована на единицу в начальный момент времени, она остается нормированной и в последующие моменты времени. Среднее значение наблюдаемой A в каждый момент времени выражается скалярным произведением

$$\langle A \rangle = \langle \Psi, A\Psi \rangle = \int \Psi^* A\Psi d\tau.$$

При этом

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t}, A\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi, A \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right\rangle.$$

Последний член в правой части $\langle \partial A / \partial t \rangle$ равен нулю, если A не зависит явно от времени.

Используя уравнение Шредингера, а также свойство эрмитовости гамильтониана, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \langle H\Psi, A\Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi, AH\Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi, [A, H] \Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \end{aligned}$$

Отсюда следует общее уравнение, определяющее изменение во времени среднего значения A :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (72)$$

Заменяя A оператором $e^{i\mathbf{k}A}$, получаем аналогичное уравнение для изменения во времени характеристической функции статистического распределения для A .

В частности, для *всякой* наблюдаемой C , коммутирующей с гамильтонианом,

$$[C, H] = 0,$$

и от времени явно не зависящей, получаем результат

$$\frac{d}{dt} \langle C \rangle = 0,$$

т. е. среднее значение наблюдаемой C остается постоянным во времени. Но если наблюдаемая C коммутирует с гамильтонианом H , то функция $e^{i\mathbf{k}C}$ также коммутирует с H и поэтому

$$\frac{d}{dt} \langle e^{i\mathbf{k}C} \rangle = 0.$$

т. е. характеристическая функция, а, следовательно, и статистическое распределение наблюдаемой C остаются постоянными во времени.

По аналогии с классической аналитической механикой наблюдаемая C называется постоянной движения (или интегралом движения). В частности, если в начальный момент времени волновая функция была собственной функцией C , принадлежащей данному собственному значению c , то это свойство сохраняется во времени. Тогда говорят, что c является «хорошим квантовым числом». Если, в частности, H от времени явно не зависит и если динамическое состояние системы в момент времени t_0 представляется собственной функцией, общей для операторов H и C , то волновая функция остается постоянной во времени с точностью до фазового множителя; энергия и динамическая переменная C остаются вполне определенными и постоянными во времени.

§ 20. Примеры интегралов движения. Энергия. Четность

Существует наблюдаемая, всегда коммутирующая с гамильтонианом — это сам гамильтониан. Поэтому энергия является постоянной движения для всех физических систем, гамильтониан которых от времени явно не зависит. Этот результат уже был доказан в § 12.

В качестве другой возможной постоянной движения укажем *четность* (ср. с § III. 14). Четностью называется наблюдаемая P , определяемая равенством

$$P\psi(q) = \psi(-q).$$

Нетрудно проверить, что P — эрмитов оператор. Кроме того, $P^2 = 1$ и, следовательно, единственными собственными значениями P являются $+1$ и -1 ; значению $+1$ соответствуют четные функции, а значению -1 — функции нечетные.

Если гамильтониан инвариантен относительно замены $+q$ на $-q$, то

$$[P, H] = 0.$$

Действительно, если

$$H\left(-i\hbar \frac{d}{dq}, q\right) = H\left(i\hbar \frac{d}{dq}, -q\right),$$

то для любой функции $\psi(q)$:

$$PH\psi = H\left(i\hbar \frac{d}{dq}, -q\right)\psi(-q) = H\left(-i\hbar \frac{d}{dq}, q\right)\psi(-q) = HP\psi.$$

При этих условиях, если волновая функция имела некоторую четность в заданный начальный момент времени, то она будет сохранять эту четность и в дальнейшем.

Это свойство без труда может быть распространено на системы многих частиц, когда операция четности соответствует инверсии пространства ($\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i$), а наблюдаемая четности определяется равенством

$$P\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \Psi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, \dots).$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Доказать неравенство Шварца $|\langle \varphi, \psi \rangle| \leq \sqrt{\langle \varphi, \varphi \rangle \langle \psi, \psi \rangle}$, основываясь только на свойствах а), б), в) скалярного произведения (§ 2). (Достаточно учесть тот факт, что норма некоторой линейной комбинации φ и ψ по определению положительна или равна нулю.) Показать, что равенство выполняется тогда и только тогда, когда функции φ и ψ пропорциональны друг другу.

2. Рассматривается задача на собственные значения оператора $p = -i\hbar d/dq$, действующего на функции $\psi(q)$, определенные на интервале $(-\infty, +\infty)$. Проверить, что спектр оказывается непрерывным и собственные функции имеют бесконечную норму. Показать, что с помощью суперпозиции собственных функций, принадлежащих близким собственным значениям, можно построить функции с конечной нормой (собственные дифференциалы), для которых квадратичное отклонение Δp может быть сделано сколь угодно малым. Исследовать тот же вопрос для оператора

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2}.$$

3. Рассматривается оператор q , действующий на функции $\psi(q)$ с конечной нормой на интервале $(-\infty, +\infty)$. а) Образовать последовательность непрерывных функций, зависящих от параметра η , таких, что их норма и среднее значение $\langle q \rangle$ остаются не зависящими от η , а квадратичное отклонение Δq стремится к нулю при $\eta \rightarrow 0$ (существует много последовательностей этого типа). Убедиться, что эта последовательность не сходится к функции, принадлежащей пространству Гильберта. б) Образовать аналогичным образом последовательность собственных дифференциалов (это функции с конечной нормой, но они не являются непрерывными), зависящую от параметра δq , путем суперпозиции собственных «функций» $\delta(q - q_0)$, соответствующих собственным значениям, расположенным в интервале δq , и проверить, что квадратичное отклонение Δq по отношению к этим собственным дифференциалам обладает тем же свойством.

4. Проверить, что статистическое распределение измерений некоторой данной величины определяется единственным образом, несмотря на большой произвол в выборе полной ортонормированной системы собственных функций оператора, представляющего эту физическую величину (произвол в выборе фаз собственных функций, произвол в выборе собственных функций вырожденного собственного значения, произвол в нормировке функций непрерывного спектра).

5. Каким образом распространить уравнения (20) и (21) этой главы на случай непрерывного спектра?

6. В полярных координатах (r, θ, φ) компонента l_z момента импульса частицы имеет вид $-\hbar \partial/\partial\varphi$. Это наводит на мысль, что l_z и φ образуют пару дополнительных переменных. Однако, соотношение неопределенности $\Delta l_z \cdot \Delta\varphi \geq \hbar$ не имеет смысла. Объяснить почему. Показать, что когда $\Delta l_z = 0$, угол φ полностью неопределен. Разложить в ряд по собственным функциям l_z волновой пакет

$$\psi(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma(\varphi - \varphi_0 + 2n\pi)^2}.$$

Сравнить неопределенность по φ и неопределенность по l_z на этом примере и обсудить характер дополнителности указанных двух переменных.

Раздел I. КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. Общие соображения

При переходе к пределу $\hbar \rightarrow 0$ законы квантовой механики должны переходить в законы механики классической. Принцип соответствия, игравший столь значительную роль при построении новой теории, и был призван обеспечить выполнение этого основного условия.

Классическая механика, следовательно, должна хорошо описывать физические явления во всех случаях, когда величиной кванта действия можно пренебречь. Предметом данной главы является выяснение вопроса о том, при каких условиях и в какой мере это классическое приближение оказывается справедливым.

Одним из проявлений конечной величины кванта действия является существование дискретного спектра собственных значений для некоторых наблюдаемых; интервалы между соседними собственными значениями оказываются порядка $\hbar^1$). Классическое приближение будет справедливым, если можно пренебречь величиной этих интервалов, что имеет место в случае достаточно больших квантовых чисел. Это условие, основанное на принципе соответствия, было использовано уже в старой квантовой теории при вычислении постоянной Ридберга и выводе правил квантования Бора — Зоммерфельда (см. § I.13 и § I.15). Однако указанное условие несомненно не является достаточным: некоторые чисто квантовые эффекты, такие, например, как соотношения неопределенности, никак не связаны с дискретной природой спектров. С более общей точки

¹⁾ Так, в атоме водорода $E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{mc^2}{n^2}$, $\Delta E = E_{n+1} - E_n = -\frac{2n+1}{(n+1)^2} E_n$. При $\hbar \rightarrow 0$ расстояние от заданного уровня энергии $E = E_n$ до ближайшего соседнего оказывается равным $\frac{2n+1}{(n+1)^2} E$; при этом предельном переходе $n^2 \hbar^2 = \text{const}$ и, следовательно, $n \rightarrow \infty$ как $\hbar^{-1}$, поэтому $\Delta E \sim \sim O\left(\frac{1}{n}\right) + O(\hbar)$.

зрения условия применимости классического приближения совпадают с условиями применимости *геометрической оптики*.

Классическое приближение может быть сформулировано двумя различными способами.

Первый способ, интуитивно наиболее ясный, основан на приближенном описании динамического состояния каждой частицы в любой момент времени заданием ее положения и скорости. Если бы постоянная $\hbar$ была равна нулю, то это описание было бы вполне строгим, так как компоненты векторов положения и импульса частицы представлялись бы попарно коммутирующими наблюдаемыми. В действительности коммутаторы отличны от нуля

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (1)$$

что ограничивает точность такого описания, ибо соотношения неопределенности делают невозможным одновременное определение координаты и импульса частицы. Поскольку динамическое состояние системы представляется волновой функцией, самое лучшее, что можно сделать на этом пути — это построить минимизирующий волновой пакет, для которого $\Delta q_i \cdot \Delta p_i = \hbar/2$. В классическом приближении мы приписываем каждой частице координату и импульс, равные средним значениям этих величин в соответствующем квантовом состоянии, полностью пренебрегая всеми флуктуациями около средних значений. Для получения удовлетворительных результатов необходимо:

а) чтобы указанные средние значения в хорошем приближении следовали классическим законам движения;

б) чтобы пространственная протяженность волнового пакета была мала по сравнению с характерной длиной рассматриваемой задачи и оставалась таковой с течением времени.

Этот подход станет предметом обсуждения двух последующих параграфов. Мы увидим, что, исключая некоторые особые случаи, сопоставляемый частице волновой пакет с течением времени «расплывается» и через достаточно большой промежуток времени может занимать сколь угодно значительную область пространства. Поэтому полученный классический образ частицы приемлем только на конечных интервалах времени.

Другой подход основан на отождествлении квантовой системы со статистическим ансамблем классических систем. Точнее, с помощью волновой функции определяется классический статистический ансамбль, плотность которого в каждой точке пространства конфигураций равна плотности вероятности присутствия в данной точке квантовой системы, а затем доказывается, что в пределе $\hbar \rightarrow 0$ эволюция этого ансамбля подчиняется законам классической механики. Этот подход мы рассмотрим в § 4. С математической точки зрения эта формули-

ровка классического приближения²⁾ имеет ряд преимуществ, так как уравнения классической механики при этом подходе получаются как предельный случай уравнения Шредингера; условия применимости этого приближения совпадают с условиями справедливости приближения геометрической оптики.

Классическое приближение тесно связано с одним методом приближенного решения уравнения Шредингера, известного как метод ВКБ³⁾ и применимого, когда уравнение Шредингера может быть заменено своим классическим пределом всюду, кроме некоторых областей пространства около сингулярных точек. Метод ВКБ излагается во втором разделе этой главы.

§ 2. Теорема Эренфеста

Теорема Эренфеста выражает закон изменения во времени средних значений координат q и сопряженных импульсов p квантовой системы. Теорема утверждает, что уравнения движения этих средних величин формально тождественны уравнениям Гамильтона классической механики, если только все величины, фигурирующие в обеих частях классических уравнений, заменить на соответствующие средние значения.

Теорема Эренфеста непосредственно следует из общего уравнения (V.72), если применить его к переменным положению и импульса.

Пусть $q_1, \dots, q_R$ — координаты (декартовы), $p_1, \dots, p_R$ — сопряженные им импульсы и $H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ — гамильтониан системы. Согласно уравнению (V.72),

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle = \langle [q_i, H] \rangle, \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle p_j \rangle = \langle [p_j, H] \rangle.$$

Вычисление коммутаторов в правых частях уравнений было проведено в гл. V (уравнения (V.67), (V.68)). Отсюда следует результат⁴⁾:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle &= \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle & (i = 1, 2, \dots, R), \\ \frac{d}{dt} \langle p_j \rangle &= - \left\langle \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\rangle & (j = 1, 2, \dots, R). \end{aligned} \quad (I)$$

²⁾ Существует несколько вариантов указанной формулировки, ибо определение классического статистического ансамбля по заданной волновой функции неоднозначно (см. задачу 4). В § 4 приводится простейший из этих вариантов.

³⁾ Математические приемы метода ВКБ были введены лордом Рэлеем (1912 г.) при решении некоторых проблем распространения волн. Первые применения к задачам квантовой механики принадлежат Г. Джеффрису (1923 г.); в дальнейшем метод был одновременно развит Г. Вентцелем, Г. А. Крамерсом и Л. Бриллюэном (1926 г.).

⁴⁾ С учетом правильного определения операторов $\frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\frac{\partial H}{\partial q_j}$, см. стр. 206.

Следует хорошо понимать связь между системой уравнений (1) и канонической системой Гамильтона. Вообще говоря, нельзя утверждать, что средние значения $\langle q_i \rangle$ и $\langle p_j \rangle$ следуют законом классической механики. Производные по времени *классических* величин q_i и p_j являются вполне определенными функциями $\partial H / \partial p_i$, $-\partial H / \partial q_j$ этих величин; эволюция последних с течением времени полностью определяется заданием их значений в начальный момент. Согласно же уравнениям (1) производные $d\langle q_i \rangle / dt$, $d\langle p_j \rangle / dt$ равны некоторым средним значениям, вычисление которых в общем случае требует знания волновой функции $\Psi(t)$. Средние значения $\langle q_i \rangle$, $\langle p_j \rangle$ следуют законам классической механики только в той мере, в какой можно заменить в правых частях (1) средние значения функций на функции средних значений, именно

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial p_i} H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R) \right\rangle \\ \text{на } \frac{\partial}{\partial p_i} H(\langle q_1 \rangle \dots \langle q_R \rangle; \langle p_1 \rangle \dots \langle p_R \rangle), \quad (2a)$$

$$\left\langle -\frac{\partial}{\partial q_j} H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R) \right\rangle \\ \text{на } -\frac{\partial}{\partial q_j} H(\langle q_1 \rangle \dots \langle q_R \rangle; \langle p_1 \rangle \dots \langle p_R \rangle). \quad (26)$$

Эта подстановка справедлива только в том случае, если гамильтониан есть полином второго порядка по q и p (свободная частица, гармонический осциллятор, заряженная частица в постоянных электрическом и магнитном полях, см. задачи 1 и 2). Во всех остальных случаях, делая подстановку, мы пренебрегаем флуктуациями q и p около их средних значений.

Рассмотрим в качестве примера случай частицы в потенциальном поле:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Введем силу

$$\mathbf{F} = -\text{grad } V(r).$$

Уравнения Эренфеста в этом случае таковы:

$$\frac{d}{dr} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{F} \rangle$$

или

$$\langle \mathbf{F} \rangle = m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle. \quad (3)$$

что является квантовым аналогом уравнения Ньютона.

Чтобы среднее положение

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

действительно удовлетворяло классическому уравнению Ньютона, необходимо в уравнении (3) заменить среднее значение силы

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) F(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

на значение $F(\langle \mathbf{r} \rangle)$ силы в точке $\langle \mathbf{r} \rangle$. Если сила вообще равна нулю (свободная частица) или линейно зависит от радиуса-вектора $\mathbf{r}$ (гармонический осциллятор), то справедливо точное равенство $\langle F \rangle = F(\langle \mathbf{r} \rangle)$. Во всех остальных случаях указанная замена оправдана только, если волновая функция остается локализованной в достаточно малой области пространства, где величину силы можно считать практически постоянной.

§ 3. Движение и расплывание волновых пакетов

Для того чтобы движение волнового пакета можно было сопоставлять движению классической частицы необходимо, во-первых, чтобы изменения во времени положения пакета в пространстве и его импульса следовали законам классической механики, а во-вторых, чтобы размеры пакета в пространстве были достаточно малыми в любой момент времени. В действительности, как это предсказывает теорема Эренфеста, первое условие редко выполняется без второго; рассмотрим поэтому второе условие.

Основные результаты можно получить, исследуя движение волнового пакета в одном измерении $\psi(q, t)$. Пусть гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$

Выясним, как изменяются во времени средние значения $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$, а также соответствующие дисперсии

$$\chi \equiv (\Delta q)^2 = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2, \quad \omega \equiv (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2.$$

В классическом приближении пакет представляет частицу, имеющую координату и импульс

$$q_{\text{кл}} = \langle q \rangle, \quad p_{\text{кл}} = \langle p \rangle$$

соответственно⁵⁾. Отметим, что энергия этой классической частицы

$$E_{\text{кл}} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + V(\langle q \rangle)$$

не равна среднему значению $\langle H \rangle$. Если классическое приближение справедливо, $E_{\text{кл}}$ постоянна во времени вместе с разностью

$$\varepsilon = \langle H \rangle - E_{\text{кл}}. \quad (4)$$

⁵⁾ При рассмотрении волнового пакета в одном измерении в гл. II положение центра пакета определялось из условия стационарности фазы; здесь же применяется среднее значение $\langle q \rangle$. В классическом приближении различие между этими определениями пренебрежимо мало.

Если протяженность пакета $\sqrt{\chi}$ остается малой, естественно заменить функции $V(q)$, $V'(q)$ их разложениями Тейлора около точки $\langle q \rangle$, именно

$$V(q) = V_{\text{кл}} + (q - \langle q \rangle) V'_{\text{кл}} + \frac{1}{2} (q - \langle q \rangle)^2 V''_{\text{кл}} + \dots, \quad (5)$$

$$V'(q) = V'_{\text{кл}} + (q - \langle q \rangle) V''_{\text{кл}} + \frac{1}{2} (q - \langle q \rangle)^2 V'''_{\text{кл}} + \dots \quad (6)$$

Здесь $V_{\text{кл}}$, $V'_{\text{кл}}$, ... равны значениям функций V , V' , ... в точке $q = \langle q \rangle$. Если усреднить обе части равенств (5) и (6), то получится своего рода разложение средних величин в ряд по степеням величины χ :

$$\langle V \rangle = V_{\text{кл}} + \frac{1}{2} \chi V''_{\text{кл}} + \dots, \quad (7)$$

$$\langle V' \rangle = V'_{\text{кл}} + \frac{1}{2} \chi V'''_{\text{кл}} + \dots \quad (8)$$

Используя эти разложения, можно получить общие результаты, не зависящие от конкретной формы потенциала $V(q)$.

Величины $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$ подчиняются уравнениям Эренфеста:

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad (9a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle V' \rangle. \quad (9b)$$

Эти уравнения будут тождественны классическим, если правая часть уравнения (9b) может быть заменена первым членом своего разложения (8), т. е. когда можно пренебречь членом $\chi V'''_{\text{кл}}/2$ и членами более высокого порядка малости. Соответствующие члены исчезают, если $V'''(q)$ всюду равно нулю, т. е. если $V(q)$ является полиномом самого большего второго порядка по q и, в частности, при $V(q) = cq^2$ (гармонический осциллятор) или $V(q) = 0$ (свободная частица). В общем случае необходимо, чтобы потенциал $V(q)$ достаточно медленно изменялся на расстояниях порядка $\sqrt{\chi}$, т. е. на расстояниях порядка протяженности волнового пакета, так чтобы влияние V''' и производных более высокого порядка в разложении (8) было достаточно мало.

Если предположить выполнение этих условий (что эквивалентно предположению о быстрой сходимости разложений (7) и (8)), то для постоянной ϵ (см. уравнение (4)) получаем выражение

$$\epsilon \equiv \frac{\omega}{2m} + \langle V \rangle - V_{\text{кл}} \simeq \frac{1}{2m} (\omega + mV'_{\text{кл}}\chi) = \text{const}, \quad (10)$$

связывающее квадраты флуктуаций ω и χ .

Ограничимся исследованием эволюции χ с течением времени. Величина χ есть среднее значение оператора $q^2 - \langle q \rangle^2$, явно зависящего от времени, так как $\langle q \rangle$ есть функция времени. Применяя соотношение (V.72) к этому оператору, получаем после вычислений

$$\frac{d}{dt} \chi = \frac{1}{m} (\langle pq + qp \rangle - 2\langle p \rangle \langle q \rangle).$$

Повторяя такие же вычисления для $d\chi/dt$, находим

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} = \frac{2\omega}{m^2} - \frac{1}{m} (\langle V'q + qV' \rangle - 2\langle q \rangle \langle V' \rangle).$$

Заменяя в скобках в правой части уравнения оператор V' на два первых члена его разложения (6), получаем приближенное уравнение

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} \simeq \frac{2}{m^2} (\omega - mV''_{\text{кл}}\chi), \quad (11)$$

которое мы можем записать, учитывая (10), в виде

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} \simeq \frac{4}{m} (\varepsilon - V''_{\text{кл}}\chi). \quad (12)$$

Зная дисперсии χ_0 и ω_0 , а также производную $\dot{\chi}_0 \equiv d\chi_0/dt$ в начальный момент t_0 , можно получить дисперсию χ в любой последующий момент времени, решая уравнение (12) (учитывая, конечно, что величина $V''_{\text{кл}}$ может зависеть от времени); после этого дисперсия ω находится из уравнения (10). Можно оценить и ошибку, возникающую при замене $\langle V' \rangle$ на $V'_{\text{кл}}$ в уравнении (96). Таким образом, присутствуют все необходимые элементы для решения вопроса о возможности сопоставления волнового пакета и классической частицы.

Наиболее интересными примерами являются гармонический осциллятор и свободная частица, так как в этих случаях движение центра пакета совпадает с движением классической частицы. Для гармонического осциллятора ($V = m\omega^2 q^2/2$) среднее значение $\langle q \rangle$ колеблется около нуля с частотой $\omega/2\pi$, а дисперсия χ колеблется около значения $\varepsilon/m\omega^2$ с удвоенной частотой (см. задачу 1).

В случае свободной частицы ($V = 0$) среднее значение $\langle q \rangle$ следует закону равномерного прямолинейного движения со скоростью $\langle p \rangle/m$, дисперсия ω остается постоянной ($\omega = \omega_0 = 2m\varepsilon$), а для дисперсии χ имеем уравнение $d^2\chi/dt^2 = 2\omega_0/m^2$ (уравнения (11) и (12) в этом случае являются точными). Решая это уравнение, находим

$$\chi = \chi_0 + \dot{\chi}_0 t + \frac{\omega_0}{m^2} t^2. \quad (13)$$

Мы видим, что по истечении достаточно большого промежутка времени дисперсия пакета χ становится сколь угодно большой: волновой пакет для свободной частицы «расплывается».

Явление бесконечного расплывания пакета имеет важное значение, ибо ограничивает тот промежуток времени, в течение которого волновой пакет может быть сопоставлен классической частице. Кроме некоторых специальных случаев (гармонический осциллятор) расплывание пакета происходит всегда, например, в задачах о рассеянии, когда вдали от рассеивающего центра волновой пакет движется как волновой пакет для свободной частицы.

Закон расплывания волнового пакета для свободной частицы упрощается, если предположить, что в начальный момент времени мы имеем так называемый «минимизирующий» пакет,

т. е. пакет, для которого левая часть соотношения неопределенности имеет минимально возможное значение; в этом случае $\omega_0 \chi_0 = \hbar^2/4$ и $\dot{\chi}_0 = 0$ (см. задачу IV. 4). Тогда

$$\chi = \chi_0 + \frac{\omega_0}{m^2} t^2$$

или

$$\Delta q = \left[(\Delta q_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m} t \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Форма члена, вызывающего распыление, $(\Delta p_0 \cdot t/m)$, подсказывает простой классический образ, позволяющий описать процесс распыления пакета. Можно представить себе группу частиц, сконцентрированных в начальный момент времени около среднего значения $\langle q_0 \rangle$ в области с размерами Δq_0 , причем скорости частиц также распределены в интервале $\Delta v = \Delta p_0/m$ около групповой скорости пакета $v = \langle p_0 \rangle/m$. Дисперсия по скорости приводит к тому, что частицы, первоначально находившиеся в одной точке, к моменту времени t равномерно распределяются по области $\Delta v \cdot t$; следовательно, первоначальная концентрация не сохраняется, и размеры «сгустка» частиц Δq увеличиваются, следуя закону (14).

Этот закон, впрочем, может быть записан и в другой форме:

$$\Delta q = \Delta q_0 \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{D\lambda}{(\Delta q_0)^2} \right)^2 \right]^{1/2},$$

где $D \equiv vt$ есть расстояние, проходимое волновым пакетом за время t , а $\lambda = \hbar/mv$ — средняя длина волны. Распыление волнового пакета свободной частицы пренебрежимо мало, если

$$\sqrt{D\lambda} \ll \Delta q_0. \quad (15)$$

Нетрудно показать, что протяженность пакета Δq всегда превосходит длину $\sqrt{D\lambda}$ (заметим, что $D\lambda = \hbar t/m$).

§ 4. Классический предел уравнения Шредингера

Разберем теперь вторую формулировку классического приближения, упомянутую во введении к этой главе.

Для определенности рассмотрим случай частицы, движущейся в поле потенциала $V(\mathbf{r})$. Выделим модуль и фазу волновой функции:

$$\Psi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})}. \quad (16)$$

Подставляя это выражение в уравнение Шредингера и приравнявая действительные и мнимые части, получаем два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \quad (17)$$

$$m \frac{\partial A}{\partial t} + \nabla A \cdot \nabla S + \frac{A}{2} \Delta S = 0. \quad (18)$$

Эта система вещественных уравнений полностью эквивалентна уравнению Шредингера. Отметим, что уравнение (18) есть ни что иное, как уравнение непрерывности (IV. 11). Действительно, плотность вероятности $P(\mathbf{r})$ и плотность потока $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ (см. § IV. 2 и § IV. 4) выражаются формулами

$$P = A^2, \quad \mathbf{J} = A^2 \frac{\nabla S}{m},$$

а уравнение (18) умножением обеих частей на $2A$ приводится к виду

$$m \frac{\partial}{\partial t} A^2 + \operatorname{div} (A^2 \nabla S) = 0. \quad (19)$$

В классическом приближении мы опускаем член, пропорциональный $\hbar^2$ в правой части уравнения (17), что дает

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0. \quad (20)$$

Таким образом, получаем следующий результат:

В классическом приближении функция Ψ описывает «жидкость» из классических невзаимодействующих частиц массы m (статистический ансамбль), подверженных действию потенциала $V(\mathbf{r})$; плотность и плотность потока этой жидкости в каждой точке пространства в каждый момент времени соответственно равны плотности вероятности P и плотности потока вероятности $\mathbf{J}$ квантовой частицы в этой точке⁶).

Действительно, поскольку верно уравнение непрерывности этой жидкости (уравнение (19)), достаточно показать, что поле скоростей

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{J}}{P} = \frac{\nabla S}{m} \quad (21)$$

⁶) Плотность этого классического статистического ансамбля в фазовом пространстве довольно специфична, так как любой точке конфигурационного пространства соответствует определенный импульс ∇S . Решение S этого уравнения (20) есть функция действия Гамильтона, используемая в формулировке классической механики Гамильтона — Якоби.

жидкости удовлетворяет классическим законам движения жидкости. Но, учитывая определение (21), можно переписать уравнение (20) в виде

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{mv^2}{2} + V = 0.$$

Далее, записывая условие равенства нулю градиента левой части, получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad} \right) m\mathbf{v} + \operatorname{grad} V = 0;$$

отсюда следует, что частицы жидкости подчиняются уравнению движения

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = - \operatorname{grad} V,$$

что и требовалось доказать.

Важно подчеркнуть большую общность этого результата, так как он остается справедливым для систем с любым числом измерений. Плотность $P = |\Psi|^2$ есть вполне определенная функция в конфигурационном пространстве; аналогично, $\mathbf{J}$ есть вполне определенное векторное поле в этом пространстве. Читатель без труда повторит доказательство для общего случая.

Когда Ψ представляет стационарное состояние с энергией E ,

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -E,$$

уравнения (17) и (18) сводятся к

$$(\nabla S)^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{\nabla A}{A}, \quad (22)$$

$$\operatorname{div}(A^2 \nabla S) = 0. \quad (23)$$

В классическом приближении мы опускаем правую часть уравнения (22) и вновь приходим к доказанному выше результату. В этом случае Ψ описывает стационарное течение жидкости классических частиц.

Оптическая аналогия более наглядна, чем аналогия гидродинамическая, в особенности для стационарных решений. Поскольку скорости частиц пропорциональны градиенту S , траектории частиц ортогональны поверхностям равных фаз $S = \text{const}$. В оптике последние являются волновыми поверхностями, а траектории частиц совпадают с оптическими лучами⁷⁾. Классиче-

⁷⁾ В присутствии векторного потенциала электромагнитного поля $\mathbf{A}$ определение (21) классической скорости должно быть изменено следующим образом: $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\nabla S - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)$. При этом доказанная выше теорема остается верной. Понятия волновой поверхности и лучей остаются в силе, но лучи более не ортогональны волновым поверхностям; эта ситуация аналогична геометрической оптике в анизотропных средах.

ское приближение таким образом совпадает с приближением геометрической оптики: здесь в качестве следствия уравнения Шредингера мы вновь получаем тот постулат, на котором была основана теория волн вещества.

Оптическая аналогия оказывается чрезвычайно полезной при проверке условий справедливости классического приближения. Пусть приведенная длина волны λ является заданной функцией точки r

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(r))}}.$$

Тогда уравнение (22) можно записать в форме

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \left(1 + \lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \right). \quad (22')$$

Классическое приближение требует, чтобы условие

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \ll 1 \quad (24)$$

выполнялось во всем пространстве; точнее говоря, области, в которых данное условие не выполняется, должны быть настолько малы, чтобы уравнение (22) можно было заменить приближенным уравнением

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \quad (25)$$

почти всюду. Последнее уравнение есть уравнение волновых поверхностей геометрической оптики.

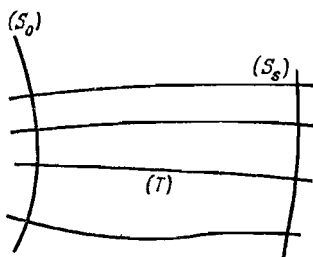


Рис. 23. Семейство траекторий (с заданной энергией E), связанных с волновой поверхностью (S_0) в приближении геометрической оптики: $(\nabla S)^2 = \hbar^2/\lambda^2$.

Если $V = 0$ во всем пространстве, то λ является постоянной, и частное решение уравнения (25) может быть записано в виде $S = pr + \text{const}$, где p — заданный вектор длины $\hbar/\lambda$ (семейство функций этого типа образует полный интеграл уравнения в частных производных первого порядка (25)). В этом случае волновые поверхности суть плоскости, перпендикулярные p , а лучи —

прямые, параллельные p . В общем случае, конечно, волновые поверхности и лучи криволинейны.

При заданной энергии E уравнение волновой поверхности $S(x, y, z) = S_0$ определяет одно и только одно решение уравнения (25). Его можно построить следующим образом. Поверхности (S_0) сопоставляется двухпараметрическое семейство траекторий классической частицы, соответствующих энергии E , которые ортогональны (S_0) и всем другим волновым поверхностям (рис. 23). Чтобы найти значение S на каждой из этих поверхностей, рассмотрим одну из траекторий (T) . Каждая точка на (T) определяется криволинейной координатой s ; начало отсчета $s = 0$ совпадает с точкой пересечения (T) и (S_0) .

Согласно уравнению (25)

$$S(s) = S_0 + \int_0^s \frac{\hbar}{\lambda} ds.$$

Таким образом, S оказывается определенной во всем пространстве, но тогда и задание A на поверхности (S_0) определяет функцию A во всем пространстве единственным образом. Уравнение (23) связывает только значения $A(s)$, взятые вдоль одной траектории, оно может быть записано в виде:

$$\frac{\hbar}{\lambda} \frac{d}{ds} (A^2) + A^2 \cdot \Delta S = 0.$$

Функции λ и ΔS вполне определены вдоль рассматриваемой траектории, поэтому это уравнение однозначно определяет функцию $A(s)$ при любых s , если задано значение $A(0)$ на пересечении траектории (T) и поверхности (S_0) .

Зная решения A и S в классическом приближении, можно оценить возмущение, вносимое присутствием члена $\lambda^2 \Delta A/A$ в точном уравнении (22). Это возмущение зависит не только от «оптических» свойств среды, в которой распространяется волна, но также и от формы рассматриваемого решения волнового уравнения.

Классическое приближение применимо, вообще говоря, если «поперечные» размеры волны всюду велики по сравнению с λ и если

$$|\operatorname{grad} \lambda| \ll 1 \quad (26)$$

во всяком случае в тех областях пространства, где плотность A^2 существенно отлична от нуля.

Эти условия получаются путем следующих полуколичественных рассуждений. Как указывает оптическая аналогия, кривизна световых лучей, т. е. траекторий частиц, должна быть мала в масштабах длины волны. Но радиус кривизны R связан со скоростью частиц v и поперечной составляющей силы — $(\operatorname{grad} V)_\perp$ соотношением

$$\frac{mv^2}{R} = |(\operatorname{grad} V)_\perp|.$$

Необходимо поэтому, чтобы

$$\frac{\lambda}{R} = \frac{\lambda |(\operatorname{grad} V)_\perp|}{mv^2} = \frac{m\lambda^2}{\hbar^2} |(\operatorname{grad} V)_\perp| \ll 1.$$

Учитывая выражение для λ как функции потенциала V , это условие можно записать так:

$$|(\operatorname{grad} \lambda)_\perp| \ll 1$$

Таким образом, кривизна волновых поверхностей должна быть мала по сравнению с $1/\lambda$ (кроме, может быть, некоторых ограниченных областей пространства вблизи фокальных поверхностей). Это в общем случае достигается если и траектории обладают тем же свойством при надлежащем выборе поверхности (S_0) . Аналогичным образом относительное изменение A на каждой волновой поверхности должно быть пренебрежимо малым на расстояниях порядка λ ; иначе говоря, «поперечные размеры» волны должны быть большими

по сравнению с λ . Если эти условия выполнены, то функция $A(s)$ вдоль траектории (T) приближенно дается соотношением

$$A(s) \simeq A(0) \sqrt{\frac{\lambda(s)}{\lambda(0)}},$$

что после небольшого вычисления дает

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \simeq \frac{\lambda^2}{A} \frac{d^2 A}{ds^2} \simeq \frac{1}{4} \left[2\lambda \frac{d^2 \lambda}{ds^2} - \left(\frac{d\lambda}{ds} \right)^2 \right].$$

Чтобы это выражение было мало, нужно, чтобы $d\lambda/ds$ и $\lambda d^2\lambda/ds^2$ были значительно меньше 1; практически второе условие выполнено всегда, когда выполнено первое, т. е. когда составляющая $\text{grad } \lambda$ вдоль траектории

$$|(\text{grad } \lambda)_{\parallel}| \ll 1.$$

§ 5. Кулоновское рассеяние. Формула Резерфорда

В качестве приложения рассмотрим кратко классическую теорию кулоновского рассеяния и условия ее применимости.

Это задача о рассеянии частиц с массой m кулоновским потенциалом $V = \frac{Ze^2}{r}$, где r — расстояние частицы от силового центра C ; этой частицей может быть, например, протон с зарядом e , который движется в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (отталкивающий потенциал). Теория применима также и в том случае, когда заряды имеют противоположные знаки (притягивающий потенциал). Поэтому мы будем рассматривать постоянную Ze^2 как алгебраическую величину, обладающую некоторым знаком.

Пусть E — энергия частицы:

$$E = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{mv_0^2}{2};$$

задается также направление движения падающей частицы и прицельный параметр (прицельное расстояние) b , что фиксирует начальные условия движения. Положим

$$a = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{E}. \quad (27)$$

Известно, что траектория является ветвью гиперболы (рис. 24) с фокусом C , полуосью $OA = |a|$ и фокальным расстоянием $OC = \sqrt{a^2 + b^2}$. Угол отклонения дается соотношением

$$b = |a| \text{ctg} \frac{\theta}{2} \quad (28)$$

(знак отклонения зависит от знака потенциала, но абсолютное значение угла зависит только от абсолютного значения потенциала).

На практике важное значение имеет величина $d\sigma/d\Omega$, называемая дифференциальным эффективным сечением. Предположим, что силовой центр бомбардируется пучком частиц одной энергии E и одного направления движения; мы желаем знать число частиц, рассеиваемых в некотором телесном угле (Ω , $\Omega + d\Omega$). Тогда $d\sigma/d\Omega$, по определению, есть число частиц, рассеиваемых в этом направлении на единицу телесного угла в единицу времени, когда распределение частиц в первоначальном пучке равномерно, а поток постоянен во времени и равен единице, т. е. если через всякую поверхность, далеко от C и перпендикулярную направлению движения, проходит одна частица в единицу времени и на единицу поверхности.

Выберем первоначальное направление пучка в качестве полярной оси и обозначим через θ и φ сферические углы направления движения рассеянной частицы; при этом θ есть введенный выше угол отклонения, связанный с прицельным параметром соотношением (28). Элемент телесного угла в направлении (θ, φ) равен $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Число $d\sigma$ частиц, рассеиваемых в единицу времени в этом телесном угле, равно числу падающих частиц, пересекающих в единицу времени поверхность $b db d\varphi$, т. е. поскольку первоначальный падающий поток равен 1

$$d\sigma = b db d\varphi = b \frac{db}{d\theta} d\theta d\varphi = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} d\Omega.$$

Заменяя в этом уравнении величины b и $db/d\theta$ их выражениями, вычисленными с помощью соотношения (28), получаем формулу Резерфорда⁸⁾

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{(Ze^2)^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (29)$$

Нам остается обосновать применение классического приближения. Заметим, что характерной длиной задачи здесь является $|a|$. Кроме того, длина волны частицы

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{p_0} \left(1 - \frac{2a}{r}\right)^{-1/2}$$

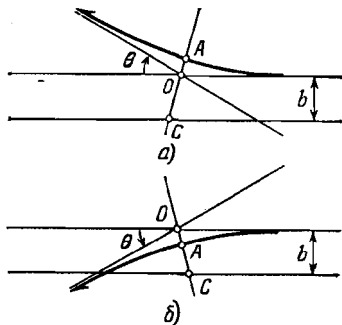


Рис. 24. Траектория (жирная линия) частицы в кулоновском поле: а) отталкивающий потенциал; б) притягивающий потенциал.

⁸⁾ Эта формула, которой мы обязаны Резерфорду, имела большое историческое значение, так как на ней была основана интерпретация его знаменитых опытов по рассеянию α -частиц.

по порядку величины равна своему первоначальному значению $\lambda_0 = \hbar/mv_0$. Отношение двух величин имеет порядок

$$\gamma = \frac{|a|}{\lambda_0} = \frac{|Ze^2|}{\hbar v_0}. \quad (30)$$

Можно ожидать, что классическое приближение справедливо, когда

$$\gamma \gg 1. \quad (31)$$

Выясним, в какой мере выполняется условие (26). Имеем

$$|\text{grad } \lambda| = \left| \frac{d\lambda}{dr} \right| = \frac{1}{\gamma} \frac{a^2}{\sqrt{r(r-2a)^3}} \ll 1;$$

$|\text{grad } \lambda|$ тем больше, чем меньше r . Поскольку классическая траектория тем ближе подходит к рассеивающему центру, чем больше угол отклонения, мы делаем вывод, что классическое приближение оправдано для малых углов отклонения (т. е. для больших прицельных параметров), но отказывается служить при больших углах отклонения. Чтобы получить количественную оценку, рассмотрим выражение для максимума $|\text{grad } \lambda|$ (т. е. его значения на вершине гиперболической траектории) как функции θ ; вычисление дает

$$|\text{grad } \lambda|_{\max} = \frac{F(\theta)}{\gamma}, \quad F(\theta) = \text{tg } \frac{\theta}{2} \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{1 - (\text{sign } a) \sin \frac{\theta}{2}}$$

(здесь $\text{sign } a \equiv |a|/a$). Когда θ увеличивается от 0 до π , функция $F(\theta)$ увеличивается от 0 до $+\infty$. Пусть угол θ_c определяется равенством

$$F(\theta_c) = \gamma.$$

Классическое приближение справедливо при $\theta < \theta_c$ и неприменимо при $\theta > \theta_c$. Заметим, что θ_c тем ближе к π , чем больше γ , в согласии с грубой оценкой, сделанной выше.

Раздел II. МЕТОД ВКБ^{3, 9)}

§ 6. Основная идея метода

Как и всякий квазиклассический метод, метод ВКБ основан на разложении всех величин по степеням постоянной $\hbar$ и пренебрежении членами более высокого порядка. Таким образом,

⁹⁾ Более подробное изложение метода см. в работах R. E. Langer, Phys. Rev. **51**, 669 (1937); W. H. Furry, Phys. Rev. **71**, 360 (1947). См. также Ф. М. Морс и Г. Феибах, Методы теоретической физики, ИЛ, 1960, т. II, стр. 90 и далее.

уравнение Шредингера заменяется (по крайней мере, в некоторых областях пространства) своим классическим пределом. Однако область применимости метода ВКБ шире, чем область применимости классического приближения как такового, ибо указанное разложение может проводиться и в тех областях пространства, где классическое приближение не имеет смысла (области $E < V$, куда доступ классическим частицам запрещен). Для того чтобы включить в рассмотрение и эти области, следует несколько изменить определения функций A и S из § 4, полагая

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} W(\mathbf{r})\right), \quad (32)$$

$$W(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{i} T(\mathbf{r}), \quad (33)$$

$$A(\mathbf{r}) = \exp T(\mathbf{r}). \quad (34)$$

Потребуем, чтобы S и T были четными функциями $\hbar$, что однозначно определяет A и S . Уравнения (17) — (18) и (22) — (23) остаются в силе, но величины A и S более не являются обязательно вещественными. Приближение ВКБ состоит в разложении $W(\mathbf{r})$ по степеням $\hbar$ и пренебрежении в уравнении Шредингера членами порядка $\hbar^2$ и выше.

§ 7. Решения ВКБ в одном измерении

Наиболее интересные применения метода ВКБ дают *одномерные задачи*. Поэтому мы ограничимся рассмотрением одномерных задач и будем искать стационарные решения уравнения Шредингера, не зависящего от времени (уравнения (22) — (23)). Метод, развитый здесь, может, вообще говоря, служить и для решения уравнения Шредингера в трех измерениях, ибо в большинстве случаев оно сводится к решению волновых уравнений в одном измерении путем разделения угловых и радиальных переменных (см. гл. IX).

Пусть $y(x)$ есть волновая функция, удовлетворяющая уравнению Шредингера,

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) y = 0.$$

Полагая

$$y = e^{i \frac{w}{\hbar}}, \quad w = S + \frac{\hbar}{i} \ln A$$

(S и $\ln A$ — четные функции $\hbar$), получаем эквивалентную систему уравнений

$$S'^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{A''}{A}, \quad (35)$$

$$2A'S' + AS'' = 0. \quad (36)$$

Уравнение непрерывности (36) интегрируется и дает

$$A = \frac{\text{const}}{\sqrt{S'}}. \quad (37)$$

Подставляя это выражение для A в уравнение (35), получаем уравнение

$$S'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4} \left(\frac{S''}{S'} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'} \right]. \quad (38)$$

Это дифференциальное уравнение третьего порядка *строго эквивалентно* уравнению Шредингера, из которого мы исходили.

Приближение ВКБ состоит в разложении S в ряд по степеням $\hbar^2$

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \dots, \quad (39)$$

подстановки этого разложения в уравнение (38) и сохранении только членов нулевого порядка

$$S'^2 \simeq S_0'^2 = 2m(E - V(x)). \quad (40)$$

Это приближенное уравнение интегрируется без затруднений.

Следует различать два случая:

1. *Случай* $E > V(x)$.

Определим длину волны

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}. \quad (41)$$

Уравнение (40) удовлетворяется, если $S' \simeq \pm \hbar/\lambda$. Решение ВКБ представляет собой линейную комбинацию осциллирующих функций

$$y(x) = \alpha \sqrt{\lambda} \cos \left(\int^x \frac{dx}{\lambda} + \varphi \right) \quad (42)$$

(α и φ — произвольные постоянные).

2. *Случай* $E < V(x)$ (область, запрещенная для классических частиц).

Пусть

$$l(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V(x) - E)}}. \quad (43)$$

Уравнение (40) удовлетворяется, если $S' \simeq \pm i\hbar/l$. Решение ВКБ представляет собой линейную комбинацию действительных экспонент

$$y(x) = \sqrt{l} \left[\gamma e^{+\int^x \frac{dx}{l}} + \delta e^{-\int^x \frac{dx}{l}} \right]. \quad (44)$$

§ 8. Условия применимости приближения ВКБ

Теория приближения ВКБ довольно сложна. Ограничимся (без доказательства) указанием того, что разложение (39) по степеням $\hbar^2$ в общем случае не сходится, а представляет собой так называемый асимптотический ряд, конечное число членов которого дает хорошее приближение для S , если $\hbar$ достаточно мало.

Чтобы найти критерий справедливости приближения ВКБ, можно вычислить второй член $\hbar^2 S_1$ разложения (39). Поправка порядка $\hbar^2$ выражается в умножении решения ВКБ на множитель $e^{i\hbar S_1}$. Поправка пренебрежимо мала, если $\hbar S_1 \ll 1$.

Если подставить разложение (39) в уравнение (38) и приравнять друг другу члены порядка $\hbar^2$, то для S_1 получим дифференциальное уравнение

$$2S'_0 S'_1 = \frac{[(S'_0)^{-1/2}]''}{(S'_0)^{-1/2}} = \frac{3}{4} \left(\frac{S''_0}{S'_0} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''_0}{S'_0}.$$

Когда $E > V$, $S'_0 = \pm \hbar/\kappa$. Это после соответствующих вычислений приводит к

$$\hbar S'_1 = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\kappa} (\sqrt{\kappa})'' = \pm \left(\frac{1}{4} \kappa'' - \frac{1}{8} \frac{\kappa'^2}{\kappa} \right),$$

откуда получаем

$$\hbar S_1 = \pm \left(\frac{\kappa'}{4} - \frac{1}{8} \int \frac{\kappa'^2}{\kappa} dx \right). \quad (45)$$

Когда же $E < V$, получаем то же выражение с заменой $\kappa(x)$ на $l(x)$. Условие $\hbar S_1 \ll 1$ выполняется, если

$$\begin{aligned} \kappa'(x) &\ll 1 \quad \text{при} \quad E > V(x), \\ l'(x) &\ll 1 \quad \text{при} \quad E < V(x). \end{aligned} \quad (46)$$

Можно связать критерий (46) и условие (26) справедливости классического приближения в общем случае.

Этот критерий выражается также с помощью неравенства, включающего потенциал $V(x)$ и его первую производную

$$\frac{|m\hbar V'|}{|2m(E-V)|^{1/2}} \ll 1. \quad (47)$$

§ 9. Граничные точки и формулы согласования

Обычно при использовании приближения ВКБ условие (47) выполняется повсюду кроме малых окрестностей точек $E = V(x)$. Это так называемые *граничные точки* классического движения, где скорость движения частицы обращается в нуль и меняет знак (точки поворота).

С математической точки зрения приближение ВКБ сводится к замене уравнения Шредингера

$$y'' + \frac{y}{\lambda^2} = 0$$

уравнением

$$y'' + \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{(\sqrt{\lambda'})''}{\sqrt{\lambda}} \right) y = 0 \quad (48)$$

(как в области $E > V$, так и в области $E < V$, где $\lambda = i\ell$). Действительно, нетрудно проверить, что выражения (42) и (44) представляют собой общие решения именно уравнения (48). Оно имеет особенность типа $(x - a)^{-2}$ в тех точках, где длина волны становится бесконечно большой, т. е. в каждой из граничных точек. В окрестностях таких точек замена уравнения Шредингера на уравнение (48) очевидно неоправдана. Чтобы получить полное решение, вообще говоря, следует решить уравнение Шредингера в малых областях вблизи граничных точек ишить эти решения с решениями (42) и (44), которые представляют волновую функцию в областях, где справедливо приближение ВКБ.

На практике, однако, нет большой необходимости знать истинную форму решения в окрестности граничной точки, если мы умеем сшивать решения ВКБ по обе стороны окрестности. Проблема сшивания решений математически довольно трудна, подробна она рассматривается в указанной статье Лангера⁹⁾; метод, предложенный Лангером, основан на замене уравнения Шредингера не уравнением (48), а другим уравнением (не имеющим особенностей в граничных точках), которое асимптотически переходит в уравнение (48) по обе стороны точки поворота. Ограничимся тем, что укажем *формулы согласования* между решениями ВКБ экспоненциального и осцилляторного типов.

Предположим ради определенности, что $E > V$ при $x > a$ и $E < V$ при $x < a$ (барьер слева). Общее решение является линейной комбинацией двух решений y_1 и y_2 , асимптотические

формы которых даются выражениями:

$$\left. \begin{aligned} y_1 &\sim \sqrt{l} \exp\left(+\int_x^a \frac{dx}{l}\right), \\ y_2 &\sim \frac{\sqrt{l}}{2} \exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \end{aligned} \right\} \text{ при } x \ll a, \quad (49)$$

$$\left. \begin{aligned} y_1 &\sim -\sqrt{\kappa} \sin\left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4}\right), \\ y_2 &\sim \sqrt{\kappa} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \right\} \text{ при } x \gg a. \quad (50)$$

Условимся определять «число длин волн», содержащихся в заданном интервале (x_1, x_2) , интегралом $(1/2\pi) \int_{x_1}^{x_2} dx/\kappa$ или

$(1/2\pi) \int_{x_1}^{x_2} dx/l$ соответственно справа и слева от граничной точки.

Условия справедливости формул согласования таковы:

1) В граничной точке кинетическая энергия $E - V$ стремится к нулю как $x - a$ и остается в хорошем приближении пропорциональной $x - a$ в области, простирающейся на одну, а еще лучше — на несколько «длин волн» по обе стороны точки поворота.

2) Каждая из «граничных областей» сшивается с «асимптотическими областями», простирающимися на много «длин волн», в которых выполняется приближение ВКБ.

При использовании формул (49) и (50) требуется известная осторожность. Дело в том, что решение $Ay_1 + By_2$ как таковое в области $x \ll a$ имеет асимптотическую форму Ay_1 , так как «экспоненциально растущий» член всегда превосходит «экспоненциально убывающий», каким бы малым по сравнению с B ни был коэффициент A , если только он не равен тождественно нулю. Поэтому задание асимптотической формы будет иметь смысл, только если она действительно «экспоненциально убывающая» (тип y_2); если коэффициенты A и B известны только приближенно и $|A| \ll |B|$, то никакое даже приближенное определение асимптотической формы решения становится невозможным.

Предположим, что мы знаем решение ВКБ в асимптотической области ($x \ll a$) и желаем найти то осцилляторное реше-

ние, с которым оно сшивается. Это можно сделать только если указанное асимптотическое решение экспоненциально затухает при $x \ll a$, т. е. имеет форму

$$\frac{1}{2} B l^{1/2} \exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right);$$

тогда в окрестности граничной точки решение, очевидно, будет иметь вид $B y_2$, а его поведение в области $x \gg a$ будет выражаться формулой (50). Результат можно записать в форме

$$\frac{1}{2} \sqrt{l} \exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \rightarrow \sqrt{\kappa} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (51)$$

причем стрелка указывает направление согласования.

Предположим, напротив, что мы задаемся решением ВКБ в «осцилляторной области» ($x \gg a$). Оно должно иметь форму (42), что можно записать в виде

$$C \sqrt{\kappa} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right)$$

(C и φ — комплексные постоянные). Согласно формулам (49) — (50) это есть асимптотическая форма решения с коэффициентами

$$A \simeq C \sin \varphi, \quad B \simeq C \cos \varphi.$$

Следует учитывать, что постоянные A и B указанной асимптотической формой определяются только приближенно. По этой причине, если $|\operatorname{tg} \varphi| \ll 1$, любое определение асимптотической формы данного решения в области $x \ll a$ становится невозможным; в противном случае она дается формулой (49). Результат запишем в виде

$$\sqrt{\kappa} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right) \rightarrow \sin \varphi \sqrt{l} \exp\left(\int_x^a \frac{dx}{l}\right); \quad (52)$$

стрелка здесь также указывает направление согласования.

В случае барьера справа, т. е. если $E > V$ при $a > x$ и $E < V$ при $a < x$, формулы согласования (51) и (52) остаются в силе, если в интегралах и неравенствах переставить x и a ; направление стрелок сохраняется.

§ 10. Прохождение потенциального барьера

В качестве иллюстрации применим метод ВКБ к вычислению коэффициента прохождения частицей потенциального барьера, изображенного на рис. 25. В области $x < a$ (область I) $V(x) = V_0 = \text{const}$, при $x > a$ потенциал $V(x)$ представляет собой положительную функцию, убывающую монотонно от значения $V_a = V(a)$ до $V(\infty) = 0$.

Пусть E — энергия частицы, b ($> a$) — точка на оси x , где $E = V(b)$. Точка разрыва a и граничная точка b делят ось x на три области I, II и III. Предполагаем, что метод ВКБ применим в областях II и III.

Чтобы найти коэффициент прохождения, следует построить решение уравнения Шредингера, асимптотическая форма которого в области III выражается только прошедшей волной (распространяющейся в направлении возрастающих x). В этой области решение ВКБ имеет форму (42). Условие, налагаемое на форму асимптотического решения, фиксирует его (с точностью до постоянного множителя) в виде

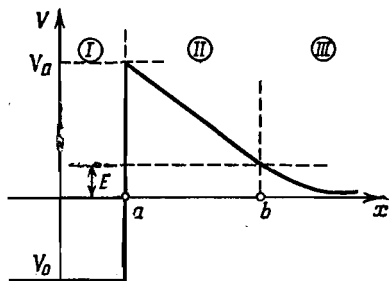


Рис. 25. Потенциальный барьер $V(x)$.

$$y_{\text{III}} = \sqrt{\kappa} \exp\left(i \int_b^x \frac{dx}{\kappa} - i \frac{\pi}{4}\right) \quad (x \gg b)$$

(фаза $\pi/4$ добавлена для удобства последующих вычислений) или

$$y_{\text{III}} = \sqrt{\kappa'} \left[\cos\left(\int_b^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4}\right) + i \sin\left(\int_b^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4}\right) \right].$$

Согласно формулам согласования (49) — (50) это решение продолжается в область II решением

$$y_{\text{II}} = -i \sqrt{l} \exp\left(\int_x^b \frac{dx}{l}\right) = -i \sqrt{l} e^{\tau} \exp\left(-\int_a^x \frac{dx}{l}\right) \quad (a < x \ll b)$$

В этом выражении

$$\tau = \int_a^b \frac{dx}{l} = \int_a^b \frac{\sqrt{2m[V(x) - E]}}{\hbar} dx.$$

Положим

$$l_a = l(a) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_a - E)}}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}.$$

В области I точное решение уравнения Шредингера имеет вид

$$y_I = A \sin[k(x - a) + \delta].$$

Постоянные A и δ определяются условиями непрерывности волновой функции и ее логарифмической производной в точке a , т. е.

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{l_a}, \quad A \sin \delta = -i \sqrt{l_a} e^\tau, \quad (53)$$

при этом y_I есть сумма падающей и отраженной волн. Поскольку δ вещественна, падающая волна $-\frac{i}{a} A \exp\{i[k(x - a) + \delta]\}$ дает поток $\frac{1}{4} |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Согласно уравнениям (53),

$$\frac{k |A|^2}{4} = \frac{k l_a}{4} \frac{e^{2\tau}}{\sin^2 \delta} = \frac{k l_a}{4} e^{2\tau} (1 + \operatorname{ctg}^2 \delta) = e^{2\tau} \frac{1 + k^2 l_a^2}{4 k l_a}.$$

Так как поток в прошедшей волне y_{III} равен $\hbar/m$, коэффициент прохождения есть

$$T = \frac{4 k l_a}{1 + k^2 l_a^2} e^{-2\tau} = 4 \frac{\sqrt{(V_a - E)(E - V_0)}}{V_a - V_0} e^{-2\tau}.$$

Чтобы указанный метод вычисления был допустим, требуется, чтобы потенциал $V(x)$ достаточно медленно изменялся в областях II и III , где использовалось приближение ВКБ (условие (47)), и чтобы в окрестности граничной точки с размерами в несколько «длин волн» потенциал $V(x)$ мог быть представлен линейной функцией x . Тем самым требуется, чтобы барьер имел «ширину» по меньшей мере в несколько «длин волн», т. е. чтобы $\tau \gg 2\pi$, а следовательно, чтобы коэффициент T был очень малым ($\leq 10^{-5}$).

§ 11. Уровни энергии в потенциальной яме

В качестве второго примера рассмотрим потенциальную яму, представленную на рис. 26, и поставим задачу нахождения уровней энергии дискретного спектра.

Каждой энергии E соответствуют две граничные точки a и b классического движения. Они делят ось x на три области: I , II и III . Будем искать решение ВКБ, экспоненциально затухающее

в областях I и III, т. е.

$$y_I = \frac{c}{2} \sqrt{l} \exp \left(- \int_x^a \frac{dx}{l} \right) \quad (x \ll a),$$

$$y_{III} = \frac{c'}{2} \sqrt{l} \exp \left(- \int_b^x \frac{dx}{l} \right) \quad (x \gg b)$$

(c и c' — постоянные). Согласно формуле согласования (50) и аналогичной формуле, соответствующей барьеру справа, эти функции имеют следующие продолжения в область II:

$$y_a(x) = c \sqrt{\kappa} \cos \left(\int_a^x \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4} \right), \quad (a \ll x \ll b).$$

$$y_b(x) = c' \sqrt{\kappa} \cos \left(\int_x^b \frac{dx}{\kappa} - \frac{\pi}{4} \right)$$

Эти функции равны $y_a(x) = y_b(x) = y_{II}$, если

$$I \equiv \int_a^b \frac{dx}{\kappa} \equiv \int_a^b \frac{\sqrt{2m[E - V(x)]}}{\hbar} dx = \left(N + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (54)$$

где N — целое число (≥ 0). Требование (54) фиксирует дискретные уровни энергии спектра. В этом случае имеем $c' = (-1)^N c$. Таким образом, получаем (с точностью до произвольного постоянного множителя) выражения y_I , y_{II} и y_{III} для соответствующей собственной функции в каждой из трех областей за исключением двух окрестностей точек a и b .

Условия применимости метода требуют, чтобы граничные области около точек a и b , где потенциал $V(x)$ должен представляться в хорошем приближении линейной функцией x , имели размеры порядка нескольких длин волн; поэтому метод применим только для очень больших квантовых чисел $N \gg 1$.

В некоторых особых случаях, например, в случае гармонического осциллятора, метод дает точные значения всех уровней

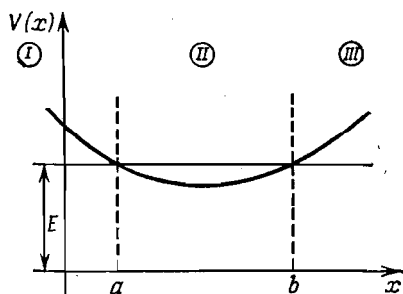


Рис. 26. Потенциальная яма $V(x)$.

энергии, включая и основное состояние (см. задачу 6). Это следует считать случайным обстоятельством.

Правило квантования (54) можно рассматривать как условие стационарности волны: интервал (a, b) должен содержать «полуцелое» (т. е. целое $+1/2$) число «полудлин» волн. Оно отличается от правила квантования Бора — Зоммерфельда только присутствием «полуцелых» квантовых чисел: с точностью до множителя $2\hbar$ интеграл I есть интеграл действия $\oint p dq$ в соответствующем классическом фазовом пространстве. Между прочим этот интеграл равен площади той части фазового пространства, где энергия меньше E

$$\omega(E) \equiv \iint_{H \leq E} dp dq.$$

Поэтому правила (54) можно записать в форме

$$\omega(E) \equiv \oint_{H=E} p dq = \left(N + \frac{1}{2}\right) h. \quad (55)$$

Согласно формуле (55), область фазового пространства $\omega(E)$ при переходе с одного уровня энергии на следующий увеличивается на h . Отсюда мы получаем следующий важный результат, касающийся распределения уровней энергии:

Объем области фазового пространства, соответствующей интервалу $(E, E + \delta E)$ в единицах h равен числу связанных состояний квантовой системы, энергия которых лежит в указанном интервале.

Условия справедливости этого результата в действительности менее ограничительны, чем условия применимости метода ВКБ; практически он всегда имеет место «в пределе больших квантовых чисел». Обычно принимают (и доказывают в простейших случаях), что этот результат применим и для систем, число степеней свободы которых R превышает единицу, если только в качестве единицы измерения объема фазового пространства взять h^R .

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Гамильтониан гармонического осциллятора выражается формулой $H = (p^2 + m^2 \omega^2 q^2)/2m$. Показать, что средние значения $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$ колеблются по синусоидальному закону с частотой $\omega/2\pi$ около начала координат, а дисперсии ω, χ (обозначения § 3) колеблются с половинным периодом около некоторого среднего значения (положительного), которое следует определить. При каких условиях ω и χ остаются постоянными?

2. Показать, что движение центра волнового пакета, представляющего заряженную частицу в электромагнитном поле, строго совпадает с движением классической частицы в двух следующих случаях: а) постоянное электрическое поле и б) постоянное магнитное поле.

3. Показать, что «расплывание» волнового пакета, представляющего заряженную частицу в постоянном электрическом поле, происходит по тому же закону, что и пакета свободной частицы ($\omega = \text{const}$, χ — квадратичная функция времени t).

4. С помощью волновой функции частицы $\psi(r)$ образуем функцию

$$D(R, P) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar} Pr} \psi^*\left(R - \frac{r}{2}\right) \psi\left(R + \frac{r}{2}\right) dr,$$

которую (согласно Вигнеру) можно интерпретировать как плотность в фазовом пространстве классического статистического ансамбля, сопоставляемого этой волновой функции¹⁰). Показать, что:

1) распределения по положению и по импульсу совпадают с соответствующими распределениями квантовой частицы в состоянии $\psi(r)$:

$$\int D(R, P) dP = |\psi(R)|^2, \quad \int D(R, P) dR = |\varphi(P)|^2,$$

где $\varphi(P)$ — волновая функция в пространстве импульсов;

2) если частица свободна, то эволюция ансамбля во времени строго совпадает с эволюцией статистического ансамбля классических частиц той же массы;

3) найти закон «расплывания» волнового пакета свободной частицы.

5. С помощью метода ВКБ вычисляется коэффициент прохождения T частицы массы m и энергии E через барьер потенциала $V(x)$, который медленно меняется в пространстве и на двух концах интервала $(-\infty, +\infty)$ стремится к значениям, меньшим E . Предполагается, что имеются только две граничные точки a и b . Показать, что

$$T = \exp\left(-2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m[V(x) - E]}}{\hbar} dx\right).$$

6. Вычислить с помощью метода ВКБ уровни энергии гармонического осциллятора (гамильтониан задачи 1). Обсудить условия применимости метода.

¹⁰) Однако в отличие от плотности в фазовом пространстве классического статистического ансамбля величина $D(R, P)$ может принимать и отрицательные значения.

§ 1. Принцип суперпозиции и представление динамических состояний векторами

Изложение основ волновой механики в гл. IV и V начиналось с определения плотностей вероятности положения и импульса с помощью волновых функций Ψ и Φ , относящихся, соответственно, к пространству конфигураций и пространству импульсов. Мы уже указывали, что эти функции соответствуют эквивалентным представлениям. Параллелизм здесь может быть доведен до конца. Действительно, основные постулаты, касающиеся средних значений (§ V.3), могут быть с тем же успехом выражены с помощью операций, производимых в импульсном пространстве. Обобщение (IV.13) и (IV.20) средних значений функций вида $F(\mathbf{r})$ и $G(\mathbf{p})$ может быть проведено, исходя из соответствующих выражений (IV.21) и (IV.14), построенных с помощью функций Φ . Вместо постулатов а), б) из § V.3 можно принять эквивалентные постулаты:

а') Всякой динамической переменной $\mathcal{A} = A(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ сопоставляется линейный оператор

$$A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \dots, p_R\right).$$

б') Среднее значение, принимаемое этой динамической переменной, когда система находится в динамическом состоянии, представляемом функцией $\Phi(p_1, \dots, p_R)$, дается выражением

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Phi, A\Phi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle},$$

где скобки в правой части обозначают скалярные произведения в пространстве импульсов:

$$\langle \Phi, A\Phi \rangle = \int \dots \int \Phi^*(A\Phi) dp_1 \dots dp_R,$$

$$\langle \Phi, \Phi \rangle = \int \dots \int \Phi^* \Phi dp_1 \dots dp_R.$$

Эквивалентность постулатов а) и б) и постулатов а') и б') основана на свойствах преобразования Фурье (см. Дополни-

ние А). Доказательство не составляет труда и мы не будем проводить его здесь.

Если функции Φ и Ψ дают эквивалентные представления одного и того же динамического состояния, то наблюдаемые

$$A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \dots, p_R\right)$$

и

$$A\left(q_1, \dots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}\right)$$

дают эквивалентные представления одной и той же динамической переменной (см. гл. IV и замечание в конце § 5). Вся теория наблюдаемых может быть с равным успехом развита как в одном, так и в другом из этих представлений. Таким образом, мы получаем две вполне эквивалентные формулировки квантовой теории.

Все это становится очевидным, если принять, что волновые функции Φ и Ψ представляют один и тот же вектор в пространстве с бесконечным числом измерений. Тогда все понятия, введенные в гл. V: функциональное пространство, скалярное произведение, норма, ортогональность и т. д., получают простое геометрическое истолкование. Согласно этой картине значения, принимаемые функцией $\Psi(q_1, \dots, q_R)$ в каждой точке конфигурационного пространства, являются составляющими данного вектора по некоторой системе ортогональных осей координат. Аналогично значения, принимаемые функцией $\Phi(p_1, \dots, p_R)$ в каждой точке импульсного пространства, являются составляющими указанного вектора по другой системе ортогональных осей координат. Что же касается коэффициентов $c_p^{(r)}$ разложения (V. 14) функции Ψ в ряд по собственным функциям некоторой заданной полной ортонормированной системы, то они являются составляющими указанного вектора по некоторой третьей системе координат и т. д.

Таким образом, можно построить всю квантовую теорию, исходя непосредственно из понятия вектора без ссылок на конкретное представление. В качестве основного принципа теории принимается *принцип суперпозиции динамических состояний*, согласно которому возможные динамические состояния квантовой системы должны обладать свойством, характерным в общем случае для всяких волн, а именно, допускать линейное сложение, и поэтому могут быть представлены как векторы в некотором линейном пространстве. Следовательно, каждому динамическому состоянию сопоставляется некоторый вектор в абстрактном пространстве, а каждой динамической переменной сопоставляется линейный оператор, действующий в этом пространстве. При таком подходе теория оказывается формально

проще и элегантнее волновой механики; она к тому же имеет и более широкую область применения, так как может быть использована для изучения квантовых систем, не имеющих классических аналогов.

В изложении этой общей формулировки квантовой теории мы будем следовать Дираку, используя введенные им чрезвычайно удобные обозначения¹⁾. Содержание данной главы посвящено понятиям линейной алгебры²⁾, которые составляют математический аппарат теории. Описание физических явлений с помощью этого формализма и будет предметом гл. VIII.

Раздел I. ВЕКТОРЫ И ОПЕРАТОРЫ

§ 2. Векторное пространство. Кет-векторы

Согласно идеям предшествующего параграфа, каждому динамическому состоянию мы сопоставляем вектор, который, согласно Дираку, будем называть *кет-вектором* или просто *кет* и обозначать символом $|\rangle$. Чтобы отличать кет-векторы один от другого, мы снабдим каждый символ либо некоторой буквой, либо одним или несколькими индексами, могущими принимать как дискретные, так и непрерывно изменяющиеся значения в зависимости от конкретной ситуации. Так, кет u представляется символом $|u\rangle$.

Кет-векторы образуют линейное векторное пространство: всякая линейная комбинация нескольких кет-векторов также является кет-вектором. Пусть, например, заданы два кет-вектора $|1\rangle$ и $|2\rangle$ и два произвольных комплексных числа λ_1, λ_2 , тогда линейная комбинация

$$|v\rangle = \lambda_1 |1\rangle + \lambda_2 |2\rangle \quad (1)$$

есть вектор в пространстве кет-векторов.

Аналогично, если $|\xi\rangle$ зависит от непрерывно изменяющегося индекса ξ , а $\lambda(\xi)$ — некоторая комплекснозначная функция ξ , то интеграл

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi) |\xi\rangle d\xi \quad (2)$$

есть вектор в пространстве кет-векторов. Мы также будем говорить, что $|w\rangle$ есть линейная комбинация (или линейная суперпозиция) кет-векторов $|\xi\rangle$.

¹⁾ P. A. M. Dirac, loc. cit., сноска II⁸.

²⁾ Строгое и полное изложение всех этих вопросов можно найти в книгах A. Lichnerowicz и M. H. Stone, loc. cit., сноска V³.

По определению кет-векторы из некоторой совокупности являются *линейно независимыми*, если ни один из них не может быть представлен в виде линейной комбинации остальных (эта линейная комбинация может быть вида (1) или (2) или смешанного вида).

Если векторное пространство содержит максимум n линейно независимых векторов, то это конечномерное пространство и число его измерений по определению равно n . Если в таком векторном пространстве как-то выбрать n линейно независимых векторов, то все остальные векторы пространства могут быть представлены как линейные комбинации данных n векторов.

Если число линейно независимых векторов рассматриваемого линейного векторного пространства неограничено, то пространство является бесконечномерным. Таково пространство Гильберта, а также, как мы видели ранее, пространство волновых функций волновой механики. Однако всегда можно выбрать такую последовательность (бесконечную счетную или континуальную) линейно независимых векторов, что каждый вектор пространства может быть представлен как линейная комбинация (бесконечный ряд или интеграл) этих «базисных векторов».

Пусть задано пространство кет-векторов $\mathcal{E}$; рассмотрим последовательность кет-векторов из этого пространства. Множество кет-векторов последовательности и всех их линейных комбинаций образуют линейное векторное пространство $\mathcal{E}'$. По определению $\mathcal{E}'$ есть пространство, *натянутое* на кет-векторы последовательности. Всякий кет-вектор пространства $\mathcal{E}'$ принадлежит и пространству $\mathcal{E}$: говорят, что $\mathcal{E}'$ является *подпространством* $\mathcal{E}$. Если пространство $\mathcal{E}$ имеет конечное число измерений n , то число измерений пространства $\mathcal{E}'$, очевидно, конечно и не превосходит n . Если же пространство $\mathcal{E}$ бесконечномерно, то никаких ограничений на число измерений пространства $\mathcal{E}'$ не существует.

§ 3. Дуальное пространство. Бра-векторы

В линейной алгебре хорошо известно, что каждому векторному пространству можно сопоставить дуальное векторное пространство. Действительно, всякая линейная функция $\chi(|u\rangle)$ кет-векторов $|u\rangle$ удовлетворяет принципу суперпозиции, характерному для векторов линейного пространства³⁾, и определяет,

³⁾ Свойство линейности χ выражается соотношением

$$\chi(\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle) = \lambda_1\chi(|1\rangle) + \lambda_2\chi(|2\rangle).$$

Очевидно, что если две функции χ_1 , χ_2 обладают этим свойством, то всякая линейная комбинация типа $\mu_1\chi_1 + \mu_2\chi_2$ также им обладает.

следовательно, вектор нового типа, который мы, согласно Дираку, будем называть *бра-вектором* или просто *бра*, а представлять его будем символом $\langle \mid$. Так, функция $\chi(|u\rangle)$ определяет бра-вектор $\langle \chi|$; значение, принимаемое этой функцией при некотором данном кет-векторе $|u\rangle$, есть некоторое число (в общем случае комплексное), которое мы будем обозначать символом $\langle \chi|u\rangle$.

По определению бра-вектор $\langle \Phi|$ равен нулю, если функция $\langle \Phi|u\rangle$ равна нулю при любом $|u\rangle$:

$$\langle \Phi| = 0, \text{ если } \langle \Phi|u\rangle = 0 \text{ при любом } |u\rangle. \quad (3)$$

Аналогично два бра-вектора равны

$$\langle \Phi_1| = \langle \Phi_2|, \text{ если } \langle \Phi_1|u\rangle = \langle \Phi_2|u\rangle \text{ при любом } |u\rangle.$$

Если пространство кет-векторов имеет конечное число измерений, то дуальное пространство имеет то же число измерений. Если число измерений пространства кет-векторов бесконечно, то пространство, дуальное ему, обладает тем же свойством.

Чтобы ввести метрику в определенное выше векторное пространство, предположим, что существует взаимоднозначное соответствие между векторами пространства и векторами дуального пространства. Бра- и кет-векторы, сопоставляемые друг другу в этом взаимоднозначном соответствии, называются сопряженными друг другу и отмечаются одной буквой (или одинаковыми индексами): так, бра-вектор, сопряженный кет-вектору $|u\rangle$, обозначается символом $\langle u|$.

Предположим кроме того, что это соответствие *антилинейно*. Иначе говоря, бра-вектор, сопряженный кет-вектору

$$|v\rangle = \lambda_1 |1\rangle + \lambda_2 |2\rangle, \quad (4)$$

есть

$$\langle v| = \lambda_1^* \langle 1| + \lambda_2^* \langle 2|. \quad (5)$$

Аналогично бра-вектор, сопряженный кет-вектору

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi) |\xi\rangle d\xi, \quad (6)$$

есть

$$\langle w| = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda^*(\xi) \langle \xi| d\xi. \quad (7)$$

Таким образом, соответствие между кет- и бра-векторами аналогично соответствию между волновыми функциями волновой механики и комплексно сопряженными функциями. Заметим,

кстати, что если кет-вектор равен нулю, то сопряженный ему бра-вектор также равен нулю и наоборот.

Совокупность бра-векторов, сопряженных кет-векторам из подпространства $\mathcal{E}'$ пространства $\mathcal{E}$, образует подпространство, дуальное $\mathcal{E}'$.

§ 4. Скалярное произведение

По определению *скалярное произведение* кет-вектора $|u\rangle$ на кет-вектор $|v\rangle$ есть число (в общем случае комплексное) $\langle v|u\rangle$, т. е. значение $v(|u\rangle)$, принимаемое линейной функцией, ассоциированной с бра-вектором, сопряженным $|v\rangle$.

Как следствие самого определения скалярное произведение является линейным по отношению к $|u\rangle$ и антилинейным по отношению к $|v\rangle$. Мы предполагаем, что скалярное произведение обладает всеми остальными свойствами, характерными для скалярного произведения волновых функций в волновой механике (§ V. 2), а именно:

1°. Скалярное произведение $|v\rangle$ на $|u\rangle$ есть величина, комплексно сопряженная скалярному произведению $|u\rangle$ на $|v\rangle$:

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*. \quad (8)$$

2°. Всякий вектор u имеет вещественную неотрицательную норму $N_u \equiv \langle u|u\rangle^*$)

$$\langle u|u\rangle \geq 0. \quad (9)$$

Она равна нулю в том и только в том случае, когда вектор $|u\rangle$ равен нулю. Из этих свойств вытекает *неравенство Шварца*: каковыми бы ни были $|u\rangle$ и $|v\rangle$, всегда

$$|\langle u|v\rangle|^2 \leq \langle u|u\rangle \langle v|v\rangle. \quad (10)$$

Равенство имеет место в том и только в том случае, когда векторы $|u\rangle$ и $|v\rangle$ коллинеарны (т. е. пропорциональны).

Эти аксиомы должны быть дополнены предположением, что пространство кет-векторов $\mathcal{E}$ (а также дуальное ему пространство бра-векторов) является полным и сепарабельным (см. § V. 2): это *пространство Гильберта*.

По определению два вектора *ортогональны*, если их скалярное произведение равно нулю. Два подпространства $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$ ортогональны, если каждый из векторов одного подпространства ортогонален каждому вектору другого подпространства. Очевидно, что в этом случае подпространства $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$ не имеют ни одного общего вектора; действительно, любой вектор, принадлежащий обоим подпространствам, может быть только рав-

*) В математической литературе норма вектора определяется как $\sqrt{\langle u|u\rangle}$. (Прим. перев.)

ным нулю, ибо он должен быть ортогонален сам себе, а следовательно, иметь нулевую норму.

Множество векторов, ортогональных к $\mathcal{E}_1$, образует подпространство $\mathcal{E}_1^\perp$, ортогональное $\mathcal{E}_1$, — это *подпространство, дополнительное* к $\mathcal{E}_1$. Подпространство $\mathcal{E}_1^\perp$ сводится к нулю, если подпространство $\mathcal{E}_1$ совпадает с самим пространством $\mathcal{E}$. Можно показать²⁾, что *всякий вектор пространства $\mathcal{E}$ может быть единственным образом представлен как сумма вектора из $\mathcal{E}_1$ и вектора из дополнительного подпространства:*

$$|u\rangle = |u_1\rangle + |u_1^\perp\rangle.$$

Вектор $|u_1\rangle$, по определению, есть *проекция* $|u\rangle$ на подпространство $\mathcal{E}_1$. Мы еще вернемся подробно к понятию проекции в разделе II.

Во всех рассуждениях, касающихся скалярного произведения, молчаливо предполагалось, что векторы (и кет, и бра) обладают конечной нормой, в противном случае аксиома о норме теряет всякий смысл. Если это действительно так, то рассматриваемое пространство кет-векторов есть пространство Гильберта. В гл. V мы видели, что векторы, способные представлять динамические состояния, действительно должны иметь конечную норму, но что рассмотрение проблемы непрерывного спектра в задачах на собственные значения требует введения собственных векторов с бесконечной нормой. Поэтому мы должны ввести в наше пространство $\mathcal{E}$ также и векторы $|\xi\rangle$ с бесконечной нормой, зависящие от одного (по крайней мере) непрерывного индекса, и распространить на эту категорию векторов понятие скалярного произведения.

Мы принимаем, что $|\xi\rangle$ имеет конечное скалярное произведение $\langle u|\xi\rangle$ со всяким вектором $|u\rangle$ с конечной нормой и что это скалярное произведение линейно по отношению к $|\xi\rangle$ и антилинейно по отношению к $|u\rangle$. Аналогично определяется скалярное произведение $\langle\xi|u\rangle$, причем принимается, что

$$\langle\xi|u\rangle = \langle u|\xi\rangle^*.$$

В противоположность этому скалярное произведение двух векторов типа $|\xi\rangle$ может и не сходиться. В частности, норма $|\xi\rangle$ расходится. Но мы предположим, что собственный дифференциал

$$|\xi, \delta\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\delta\xi}} \int_{\xi}^{\xi+\delta\xi} |\xi'\rangle d\xi' \quad (11)$$

обладает положительно определенной нормой, которая стремится к конечному пределу, когда $\delta\xi \rightarrow 0$. Строго говоря, вектор

$|\xi\rangle$ не входит в пространство $\mathcal{E}$, но его собственные дифференциалы или, в более общем случае, линейные комбинации типа (2) принадлежат этому пространству и удовлетворяют всем требованиям, характеризующим векторы пространства Гильберта.

§ 5. Линейные операторы

Определив пространство кет-векторов, можно перейти к определению линейных операторов, действующих в этом пространстве (см. § II.11).

Предположим, что каждому кет-вектору $|u\rangle$ векторного пространства соответствует некоторый кет-вектор $|v\rangle$: говорят, что $|v\rangle$ получается в результате действия на $|u\rangle$ некоторого оператора. Если, кроме того, это соответствие линейно, то оно определяет некоторый *линейный оператор* A . Пишут

$$|v\rangle = A|u\rangle.$$

Такой оператор равен нулю, если вектор $|v\rangle$ равен нулю при любом векторе $|u\rangle$.

Чтобы оператор A был равен нулю, необходимо и достаточно, чтобы каким бы ни был вектор $|u\rangle$,

$$\langle u|A|u\rangle = 0.$$

Доказательство этого свойства не представляет серьезных трудностей, мы не будем на нем останавливаться. Отсюда немедленно следует:

Чтобы два оператора A и B были равны, необходимо и достаточно, чтобы, каким бы ни был вектор $|u\rangle$,

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle. \quad (12)$$

Основные операции алгебры операторов были уже указаны (§ II.11): умножение на постоянную, сумма и произведение. Сложение линейных операторов является операцией ассоциативной и коммутативной. Умножение ассоциативно, дистрибутивно по отношению к сумме, но — и в этом основное различие между обычной алгеброй и алгеброй линейных операторов — *умножение не коммутативно*. Напомним, что коммутатор двух линейных операторов A и B обозначается символом

$$[A, B] \equiv AB - BA.$$

Основные свойства алгебры коммутаторов изучались в § V.17 (уравнения (V.63—66)); они все остаются в силе и не будут вновь излагаться здесь.

Заметим, что операция умножения кет-вектора на заданную постоянную c также выражает действие линейного оператора. Этот оператор c коммутирует со всеми линейными операторами,

какими бы они ни были: $[A, c] = 0$. В частности, умножение на 1 есть единичный оператор.

Если соответствие между $|u\rangle$ и $|v\rangle$, определенное выше, является взаимнооднозначным, то оно определяет два линейных оператора A и B :

$$|v\rangle = A|u\rangle, \quad |u\rangle = B|v\rangle. \quad (13)$$

Эти операторы, по определению, *обратны* друг другу. Говорят еще, что операторы A и B обратны друг другу, если они одновременно удовлетворяют уравнениям

$$AB = 1, \quad BA = 1. \quad (14)$$

Эти два определения эквивалентны.

Оператор, обратный данному, существует не всегда. Когда он существует, его обычно выражают символом A^{-1} . Пользуясь соотношениями (14), легко получить следующее свойство. Если операторы P , Q имеют обратные операторы, то произведение PQ также имеет обратный оператор, причем

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1} \quad (15)$$

(отметим перестановку порядка сомножителей в правой части (15)).

Если действие линейного оператора A в пространстве кет-векторов известно, то его действие в дуальном векторном пространстве однозначно определяется следующим образом. При задании бра-вектора $\langle\chi|$ скалярное произведение $\langle\chi|(A|u\rangle)$ есть несомненно линейная функция $|u\rangle$, так как оператор A линеен. Пусть $\langle\eta|$ есть бра-вектор, определяемый этой функцией; тогда каждому бра-вектору $\langle\chi|$ соответствует бра-вектор $\langle\eta|$. Ясно, что это соответствие линейно (свойства скалярного произведения). Говорят, что $\langle\eta|$ получается в результате действия A на $\langle\chi|$ и пишут

$$\langle\eta| = \langle\chi|A. \quad (16)$$

Следуя этому определению, получаем тождество

$$\langle\chi|A|u\rangle = \langle\chi|(A|u\rangle). \quad (17)$$

Скобки в этих двух выражениях оказываются, таким образом, лишними и мы будем писать просто $\langle\chi|A|u\rangle$ для обоих равных скалярных произведений.

С помощью тождества (17) можно определить различные операции алгебры линейных операторов, действующих на бра-векторы. В частности, для трех основных операций имеем:

(а) умножение A на комплексную постоянную c :

$$(cA)|u\rangle = c(A|u\rangle), \quad \text{откуда} \quad \langle\chi|(cA) = c(\langle\chi|A);$$

(б) сумма операторов $S = A + B$:

$$S|u\rangle = A|u\rangle + B|u\rangle, \text{ откуда } \langle\chi|S = \langle\chi|A + \langle\chi|B;$$

(в) произведение операторов $P = AB$:

$$P|u\rangle = A(B|u\rangle), \text{ откуда } \langle\chi|P = (\langle\chi|A)B.$$

При этом действует условие, что бра-векторы пишутся слева, а кет-векторы — справа от символа оператора, тогда алгебраические манипуляции с линейными операторами в обоих случаях производятся одинаково.

Некоторые операторы при использовании указанных выше обозначений оказываются особенно простыми в обращении: это операторы типа $|u\rangle\langle v|$, действие которых на кет $|w\rangle$ дает кет, пропорциональный $|u\rangle$, а именно кет $|u\rangle\langle v|w\rangle$ (множитель пропорциональности $\langle v|w\rangle$), а действие на любой бра $\langle w|$ дает бра, пропорциональный $\langle v|$, а именно бра $\langle w|u\rangle\langle v|$. Оператор $|u\rangle\langle v|$ не имеет обратного.

§ 6. Тензорное произведение⁴⁾ двух векторных пространств

Чтобы завершить это введение в векторную алгебру, остается определить часто используемую операцию образования тензорного произведения двух векторных пространств.

Смысл и интерес этой операции можно иллюстрировать следующим примером. Рассмотрим квантовую систему, состоящую из двух частиц. Произведение $\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$ волновой функции $\Psi_1(r_1)$, относящейся к первой частице, на волновую функцию $\Psi_2(r_2)$, относящуюся ко второй частице, представляет некоторое частное состояние этой системы (§ IV.6). Самая общая волновая функция $\Psi(r_1, r_2)$ не есть указанное произведение функций, но может быть всегда представлена как линейная комбинация волновых функций такого вида. Одним из многочисленных способов добиться этого является разложение Ψ в ряд по полной системе ортонормированных функций r_1 ; поскольку коэффициенты такого ряда являются функциями r_2 , каждый член ряда имеет форму указанного выше произведения. Таким образом, полное пространство волновых функций системы образовано линейными комбинациями произведений волновых функций, относящихся к каждой из отдельных систем $\Psi_1(r_1)$ и $\Psi_2(r_2)$. Говорят, что пространство функций $\Psi(r_1, r_2)$ является тензорным произведением пространства функций $\Psi_1(r_1)$ и пространства функций $\Psi_2(r_2)$.

Произведения $\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$ играют особую роль при изучении полной системы. Действительно, динамические переменные

⁴⁾ Произведение этого типа часто называется кронекеровым произведением.

частицы 1 представляются некоторыми наблюдаемыми A_1 , действующими на функцию $\Psi(r_1, r_2)$, рассматриваемую как функция r_1 ; динамические переменные частицы 2 представляются наблюдаемыми A_2 , действующими на ту же функцию, но рассматриваемую как функция r_2 . Ясно, что каждая наблюдаемая A_1 коммутирует с каждой наблюдаемой A_2 . Когда Ψ имеет вид $\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$, действие наблюдаемых этого типа особенно просто; так, например, $A_1(\Psi_1\Psi_2)$ равно произведению $A_1\Psi_1$ на Ψ_2 .

Предшествующие замечания относятся к любым квантовым системам, допускающим разделение на две более простые системы.

На абстрактном математическом языке, которым мы пользуемся в этой главе, тензорное произведение может быть определено следующим образом. Пусть мы имеем два векторных пространства $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$. Взяв один кет-вектор $|u\rangle^{(1)}$ из первого и один кет-вектор $|u\rangle^{(2)}$ из второго пространства, можно образовать произведение кет-векторов $|u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)}$. Операция образования такого произведения коммутативна и мы используем обозначение

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle \equiv |u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)}. \quad (18)$$

Кроме того, предположим, что эта операция дистрибутивна по отношению к сумме. Если

$$|u\rangle^{(1)} = \lambda |v\rangle^{(1)} + \mu |w\rangle^{(1)},$$

то

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda |v^{(1)}u^{(2)}\rangle + \mu |w^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

Аналогично, если

$$|u\rangle^{(2)} = \lambda |v\rangle^{(2)} + \mu |w\rangle^{(2)},$$

то

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda |u^{(1)}v^{(2)}\rangle + \mu |u^{(1)}w^{(2)}\rangle.$$

На кет-векторы $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ натянуто новое векторное пространство, пространство $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$, которое называется *тензорным произведением векторных пространств $\mathcal{E}^{(1)}$ и $\mathcal{E}^{(2)}$* . Если размерности этих пространств равны соответственно N_1 и N_2 , то число измерений пространства-произведения равно N_1N_2 . Однако операция образования тензорного произведения возможна и когда пространства обладают бесконечным числом измерений, как это показывает разобранный выше пример.

Каждому линейному оператору $A^{(1)}$ пространства $\mathcal{E}^{(1)}$ соответствует линейный оператор пространства-произведения, который мы обозначим тем же символом. Если действие оператора $A^{(1)}$ на любой кет $|u\rangle^{(1)}$ известно

$$A^{(1)}|u\rangle^{(1)} = |v\rangle^{(1)},$$

то действие этого оператора на кет-векторы $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ пространства-произведения определяется формулой

$$A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}u^{(2)}\rangle, \quad (19)$$

а его действие на произвольный кет-вектор пространства-произведения получается с помощью линейной суперпозиции. Аналогично каждый линейный оператор $A^{(2)}$ пространства $\mathcal{E}^{(2)}$ позволяет определить линейный оператор в пространстве-произведении.

Каждый из операторов $A^{(1)}$ коммутирует с каждым из операторов $A^{(2)}$

$$[A^{(1)}, A^{(2)}] = 0.$$

Нетрудно проверить, пользуясь самими определениями операторов $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$, что действие коммутатора на всякий вектор $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ дает нуль:

$$A^{(1)}A^{(2)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}v^{(2)}\rangle = A^{(2)}A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

В пространстве-произведении можно определить соответствие между кет- и бра-векторами, действие линейных операторов на бра-векторы и т. д. Алгебраические правила, указанные выше, остаются справедливыми для всех алгебраических операций в пространстве-произведении. Доказательство этих результатов не составляет труда и будет здесь опущено.

Раздел II. ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ, ПРОЕКТОРЫ И НАБЛЮДАЕМЫЕ

§ 7. Сопряженные операторы и правила сопряжения

Исходя из взаимоднозначного соответствия между сопряженными бра- и кет-векторами, можно получить аналогичное правило сопряжения между линейными операторами.

Пусть A — линейный оператор. Пусть $|v\rangle$ есть кет-вектор, сопряженный бра-вектору $\langle u|A$. Вектор $|v\rangle$ зависит от бра-вектора $\langle u|$ антилинейно, следовательно, это линейная функция $|u\rangle$. Такое линейное соответствие определяет линейный оператор, который называют оператором, *эрмитово сопряженным* A , или оператором, *присоединенным* к A , и обозначают символом $A^\dagger$:

$$|v\rangle = A^\dagger|u\rangle.$$

Ясно, что $A^\dagger = 0$, если $A = 0$, и наоборот.

Поскольку $A^\dagger|u\rangle$ есть кет-вектор, сопряженный бра-вектору $\langle u|A$, скалярное произведение этого кет-вектора на произволь-

ный бра-вектор $\langle t|$ есть величина, комплексно сопряженная, скалярному произведению $|t\rangle$ на $\langle u|A$ (свойство (8)). Отсюда получаем чрезвычайно важное соотношение

$$\langle t|A^{\dagger}|u\rangle = \langle u|A|t\rangle^*. \quad (20)$$

Так как это равенство справедливо, какими бы ни были $|u\rangle$ и $|t\rangle$, кет-вектор, сопряженный $\langle t|A^{\dagger}$, равен $A|t\rangle$. Следовательно, оператор, эрмитово сопряженный оператору $A^{\dagger}$, есть сам оператор A :

$$(A^{\dagger})^{\dagger} = A. \quad (21)$$

Аналогичным образом получаем следующие фундаментальные соотношения:

$$(cA)^{\dagger} = c^*A^{\dagger}, \quad (22)$$

$$(A+B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger}, \quad (23)$$

$$(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}. \quad (24)$$

Отметим перемену порядка сомножителей в правой части (24), дающей выражение для оператора, присоединенного к AB . Далее, оператор, присоединенный к оператору $|u\rangle\langle v|$, есть

$$(|u\rangle\langle v|)^{\dagger} = |v\rangle\langle u|. \quad (25)$$

Эрмитово сопряжение для операторов играет ту же роль, что и сопряжение между бра- и кет-векторами и комплексное сопряжение для чисел. Все эти операции сопряжения имеют большое значение в развиваемом формализме. Обозначения Дирака позволяют производить их без труда в любом алгебраическом выражении. Достаточно следовать таким простым правилами: *все числа заменяются на комплексно сопряженные, все бра на сопряженные кет и наоборот, все операторы — на эрмитово сопряженные, а порядок символов в каждом члене меняется на противоположный* (т. е. порядок бра-векторов, кет-векторов и операторов).

Эти правила являются очевидным обобщением соотношений (20), (24) и (25). Дадим несколько примеров. Оператор, эрмитово сопряженный оператору $AB|u\rangle\langle v|C$, есть оператор $C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}$; бра-вектор, сопряженный кет-вектору $AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$, есть вектор $\langle w|C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}$; величина, комплексно сопряженная $\langle t|AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$, есть

$$\langle w|C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}|t\rangle$$

§ 8. Эрмитовы (самосопряженные) операторы, положительно определенные операторы, унитарные операторы

По определению линейный оператор H называется *эрмитовым*, если он является сопряженным самому себе

$$H = H^\dagger.$$

Оператор I называется *антиэрмитовым*, если

$$I = -I^\dagger.$$

Из этих определений нетрудно получить следующие свойства операторов.

Всякий линейный оператор может быть представлен (и единственным образом) в виде суммы двух операторов, одного эрмитового, а другого антиэрмитового

$$A = H_A + I_A, \quad (26)$$

причем

$$H_A = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad I_A = \frac{A - A^\dagger}{2}. \quad (27)$$

Всякая линейная комбинация эрмитовых операторов с *вещественными* коэффициентами есть эрмитов оператор. Произведение HK двух эрмитовых операторов H и K не обязательно эрмитово, ибо, согласно (24),

$$(HK)^\dagger = KH. \quad (28)$$

Оператор HK эрмитов только при условии, что H и K коммутируют. Впрочем, коммутатор $[H, K]$ есть антиэрмитов оператор, и разложение (26) произведения HK записывается в виде

$$HK = \frac{HK + KH}{2} + \frac{1}{2}[H, K]. \quad (29)$$

Оператор $|a\rangle\langle a|$ является эрмитовым оператором. С помощью двух различных кет-векторов можно образовать два эрмитовых оператора $|a\rangle\langle a|$ и $|b\rangle\langle b|$, но произведение этих двух операторов $|a\rangle\langle a|b\rangle\langle b|$ пропорционально оператору $|a\rangle\langle b|$, который не является эрмитовым; таким образом, это произведение не эрмитов оператор (кроме случая, когда $|a\rangle$ и $|b\rangle$ ортогональны друг другу, но в этом случае произведение равно нулю).

Говорят, что эрмитов оператор H является *положительно определенным*, если

$$\langle u | H | u \rangle \geq 0, \text{ каким бы ни был } |u\rangle.$$

Оператор $|a\rangle\langle a|$ есть положительно определенный эрмитов оператор.

Операторы этого типа обладают замечательными свойствами (см. задачи 7 и 8). В частности, если H — положительно определенный эрмитов оператор, имеет место обобщенное неравенство Шварца

$$|\langle u | H | v \rangle|^2 \leq \langle u | H | u \rangle \langle v | H | v \rangle$$

при любых $|u\rangle$ и $|v\rangle$; равенство реализуется в том и только в том случае, когда $H|u\rangle$ и $H|v\rangle$ пропорциональны друг другу. Кроме того, из равенства

$$\langle u | H | u \rangle = 0$$

необходимо следует $H|u\rangle = 0$.

Оператор U называется *унитарным*, если он является обратным к своему сопряженному:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1.$$

Произведение $W = UV$ двух унитарных операторов U , V есть унитарный оператор. Действительно (свойства (15) и (24)),

$$W^{-1} = V^{-1}U^{-1} = V^\dagger U^\dagger = W^\dagger.$$

§ 9. Проблема собственных значений и наблюдаемые

Пусть A — линейный оператор. Тогда, по определению, комплексное число a есть собственное значение A , а кет-вектор $|u\rangle$ есть собственный кет-вектор, принадлежащий a , если

$$A|u\rangle = a|u\rangle.$$

Аналогично $\langle u'|$ есть собственный бра-вектор, принадлежащий a' , если

$$\langle u' | A = a' \langle u' |.$$

Если $|u\rangle$ — собственный кет-вектор A , то любой вектор типа $c|u\rangle$ также есть собственный кет-вектор, принадлежащий тому же собственному значению; если существует несколько линейно независимых векторов, относящихся к одному собственному значению, то всякая линейная комбинация этих кет-векторов также принадлежит тому же собственному значению. Иными словами, множество собственных кет-векторов, принадлежащих одному данному собственному значению, образует векторное пространство; будем называть его *подпространством, относящимся к собственному значению a* . Если это подпространство одномерно, говорят, что собственное значение простое, или невырожденное. В противном случае имеет место *вырож-*

дение, причем порядок вырождения по определению равен числу измерений соответствующего подпространства; может случиться, что вырождение имеет и бесконечный порядок.

Те же замечания относятся к собственным бра-векторам. Если A — произвольный линейный оператор, то никакой простой связи между проблемой собственных значений для кет-векторов и проблемой собственных значений для бра-векторов не существует. Однако в практически важном случае эрмитового оператора A эти проблемы тесно связаны между собой.

Если A эрмитов оператор, то:

- 1) оба спектра собственных значений идентичны;
- 2) все собственные значения вещественны;
- 3) всякий бра-вектор, сопряженный собственному кет-вектору оператора A , является собственным бра-вектором, относящимся к тому же собственному значению, и наоборот; иными словами, подпространство собственных бра-векторов, относящееся к данному собственному значению, дуально подпространству собственных кет-векторов, относящемуся к тому же собственному значению.

Доказательство свойства 2) с точностью до обозначений совпадает с приведенным в § V.5. Если $A = A^+$ и $A|u\rangle = a|u\rangle$, то

$$\langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle$$

и, поскольку,

$$\langle u|A|u\rangle^* = \langle u|A^+|u\rangle = \langle u|A|u\rangle,$$

$\langle u|A|u\rangle$ вещественно вместе с $\langle u|u\rangle$, поэтому a вещественно. То же доказательство можно провести для собственного значения, относящегося к бра-вектору.

Кроме того, поскольку всякое собственное значение вещественно, равенство $A|u\rangle = a|u\rangle$ влечет за собой $\langle u|A = a\langle u|$ и обратно; отсюда без труда получаются свойства 1) и 3).

Другим важным свойством собственных векторов, принадлежащих различным собственным значениям, является свойство их *ортогональности*. Доказательство не отличается от приведенного в § V.5. Если $|u\rangle$ и $|v\rangle$ — собственные кет-векторы, принадлежащие различным собственным значениям a и b :

$$A|u\rangle = a|u\rangle, \quad \langle v|A = b\langle v|,$$

то, умножая первое уравнение скалярно слева на $\langle v|$, а второе — справа на $|u\rangle$ и вычитая одно из другого, получим

$$0 = (a - b)\langle v|u\rangle.$$

Поэтому, если $a \neq b$, то

$$\langle v | u \rangle = 0.$$

Во всех этих рассуждениях молчаливо предполагается, что собственные векторы принадлежат пространству Гильберта. Но такая постановка проблемы собственных значений оказывается слишком ограниченной и не может удовлетворить всем потребностям квантовой теории. В качестве допустимых собственных решений мы должны рассматривать также и векторы с бесконечной нормой, удовлетворяющие условиям, упомянутым в конце § 4. Эти векторы принадлежат собственным значениям из *непрерывного спектра*.

Трудности, возникающие при исследовании непрерывного спектра, подробно обсуждались в гл. V и мы не будем возвращаться к ним здесь. Основные результаты могут быть без труда выражены в наших новых обозначениях. Свойства 1), 2) и 3) остаются справедливыми в случае непрерывного спектра. Что же касается свойства ортогональности, то его удобно записывать с помощью δ -функции Дирака.

Вернемся в качестве примера к эрмитовому оператору из § V. 9, спектр собственных значений которого содержит ряд дискретных значений a_n и непрерывную часть $a(v)$. Собственные функции $\varphi_n^{(r)}$, относящиеся к собственному значению a_n , представляют ортонормированные кет-векторы, которые мы обозначаем символом $|nr\rangle$. Аналогично собственные функции $\varphi^{(r)}(v, \rho)$ представляют кет-векторы $|v\rho r\rangle$. Соотношения ортонормированности между различными кет-векторами записываются в виде (уравнение (V. 38)):

$$\langle nr | n'r' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{rr'}, \quad (30a)$$

$$\langle nr | v'\rho'r' \rangle = 0, \quad (30b)$$

$$\langle v\rho r | v'\rho'r' \rangle = \delta(v - v') \delta(\rho - \rho') \delta_{rr'}. \quad (30v)$$

Если множество собственных векторов растягивает все пространство, иначе говоря, если всякий вектор с конечной нормой может быть разложен в ряд (или интеграл) по этим собственным векторам, то говорят, что они образуют *полную* систему и что эрмитов оператор является *наблюдаемой*. Среди эрмитовых операторов пространства $\mathcal{E}$ только наблюдаемые допускают физическую интерпретацию.

Выяснение вопроса о том, является ли заданный эрмитов оператор наблюдаемой, часто является сложной математической задачей. Однако существует очень важный класс операторов, для которых эта задача решается просто — это операторы проектирования.

§ 10. Проекторы (или операторы проектирования)

Пусть S — подпространство пространства Гильберта $\mathcal{E}$, а $S^\times$ — его дополнение. Всякий кет-вектор $|u\rangle$ обладает проекцией на подпространство S и проекцией на подпространство $S^\times$; эти два вектора $|u_S\rangle$ и $|u_S^\times\rangle$ определяются единственным образом, так что

$$|u\rangle = |u_S\rangle + |u_S^\times\rangle. \quad (31)$$

Каждому кет-вектору $|u\rangle$ соответствует, таким образом, один и только один кет-вектор $|u_S\rangle$. Легко видеть, что это соответствие линейно. Оно определяет некоторый линейный оператор P_S , который называется *оператором проектирования* на подпространство S (или *проектором* на S):

$$P_S |u\rangle = |u_S\rangle.$$

Это эрмитов оператор. Действительно, каким бы ни был $|v\rangle$,

$$\langle u | P_S | v \rangle = \langle u | v_S \rangle = \langle u_S | v_S \rangle = \langle u_S | v \rangle,$$

следовательно,

$$\langle u | P_S = \langle u_S |.$$

Очевидно, что P_S является наблюдаемой с двумя собственными значениями 0 и 1, подпространствами которых являются, соответственно, $S^\times$ и S .

Кроме того, поскольку при любом $|u\rangle$,

$$P_S^2 |u\rangle = P_S (P_S |u\rangle) = P_S |u_S\rangle = |u_S\rangle = P_S |u\rangle,$$

P_S удовлетворяет операторному уравнению

$$P_S^2 = P_S.$$

Обратно, можно утверждать, что всякий эрмитов оператор P , удовлетворяющий уравнению

$$P^2 = P, \quad (32)$$

является проектором. Подпространство S , на которое он проектирует, является подпространством, принадлежащим его собственному значению 1.

Действительно, если p есть собственное значение этого оператора, а $|p\rangle$ — один из соответствующих собственных векторов

$$P |p\rangle = p |p\rangle,$$

то, согласно уравнению (32),

$$0 = (P^2 - P) |p\rangle = (p^2 - p) |p\rangle,$$

и, поскольку кет-вектор $|p\rangle$ не равен нулю, $p^2 - p = 0$. Иначе говоря, возможными собственными значениями являются только 0 и 1.

Оператор P есть наблюдаемая, так как всякий вектор $|u\rangle$ может быть представлен в виде суммы собственных векторов оператора P . Действительно, можно написать

$$|u\rangle = P|u\rangle + (1 - P)|u\rangle. \quad (33)$$

Вектор $P|u\rangle$ есть собственный кет-вектор оператора P , принадлежащий собственному значению 1, так как по уравнению (32)

$$P^2|u\rangle \equiv P(P|u\rangle) = P|u\rangle.$$

Вектор же $(1 - P)|u\rangle$ есть собственный вектор, принадлежащий собственному значению 0, ибо

$$P(1 - P)|u\rangle = (P - P^2)|u\rangle = 0.$$

Нетрудно проверить, что векторы $P|u\rangle$ и $(1 - P)|u\rangle$ ортогональны друг другу, а поэтому сумма их норм равна норме вектора $|u\rangle$. Таким образом, эти векторы с конечной нормой, они принадлежат пространству Гильберта.

Пусть S есть подпространство собственных векторов P , относящихся к собственному значению 1. Дополнительное к S подпространство $S^\times$ есть подпространство векторов, ортогональных векторам подпространства S ; оно образовано множеством собственных векторов P , принадлежащих собственному значению 0. Согласно разложению (33), действие P на произвольный вектор $|u\rangle$ сводится к проектированию этого вектора на S . Поэтому оператор P и называется оператором проектирования на S . Тогда ясно, что оператор $(1 - P)$ есть оператор проектирования на $S^\times$.

Свойство, касающееся нормы $P|u\rangle$, упомянутое выше, может быть переписано в виде

$$0 \leq \langle u|P|u\rangle \leq \langle u|u\rangle. \quad (34)$$

Если $\langle u|P|u\rangle = 0$, то вектор $|u\rangle$ содержится целиком в $S^\times$.

Если $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$, то вектор $|u\rangle$ содержится целиком в S .

Заслуживают упоминания два предельных случая. Когда подпространство S совпадает с самим пространством $\mathcal{E}$, всякий кет-вектор $|u\rangle$ является своей собственной проекцией: имеем $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$ при любых $|u\rangle$; подпространство $S^\times$ пусто. Это случай $P = 1$.

Другой крайний случай реализуется тогда, когда подпространство S пусто (дополнительное подпространство $S^\times$ совпадает с самим пространством $\mathcal{E}$): $\langle u|P|u\rangle = 0$ при любом $|u\rangle$. Это случай $P = 0$.

Приведем несколько типичных примеров операторов проектирования.

Пусть кет-вектор $|a\rangle$ нормирован на единицу. Он растягивает одномерное подпространство. Обозначим символом $|u_a\rangle$ проекцию произвольного вектора $|u\rangle$ на это подпространство

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_a^\times\rangle. \quad (35)$$

Согласно предположению

$$\langle a|u_a^\times\rangle = 0, \quad |u_a\rangle = c|a\rangle.$$

Умножая слева обе стороны уравнения (35) на $\langle a|$, получаем $c = \langle a|u\rangle$. Следовательно

$$|u_a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle.$$

Таким образом, оператором проектирования на $|a\rangle$ является оператор

$$P_a \equiv |a\rangle\langle a| \quad (\langle a|a\rangle = 1), \quad (36)$$

Операторы проектирования этого типа мы будем называть *элементарными проекторами*.

Рассмотрим теперь последовательность ортонормированных векторов $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (m, n = 1, 2, \dots, N).$$

На эти векторы натягивается некоторое подпространство $\mathcal{E}_1$ (с числом измерений N) того пространства, которому принадлежат указанные векторы. Нетрудно показать, что оператор

$$P_1 \equiv \sum_{m=1}^N |m\rangle\langle m| \quad (37)$$

является оператором проектирования на $\mathcal{E}_1$.

До сих пор рассматривались только векторы с конечной нормой. Но как мы знаем, можно рассматривать и последовательности кет-векторов $|\xi\rangle$, зависящих от непрерывного индекса, изменяющегося в некоторой области (ξ_1, ξ_2) . Предположим, что собственные дифференциалы, образованные из этих кет-векторов, имеют конечную норму и принадлежат исследуемому пространству Гильберта. Поэтому, как было выяснено ранее, любая линейная комбинация этих векторов также принадлежит пространству Гильберта, а множество линейных комбинаций образует подпространство полного пространства Гильберта; это подпространство $\mathcal{E}_2$ натянуто на кет-векторы $|\xi\rangle$. Предположим, далее, что векторы $|\xi\rangle$ удовлетворяют условию «ортонормированности»

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \delta(\xi' - \xi). \quad (38)$$

Очевидно, что оператор

$$P_2 \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle d\xi \langle \xi| \quad (39)$$

есть оператор проектирования на $\mathcal{E}_2$. На самом деле, вектор

$$P_2|u\rangle \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle d\xi \langle \xi|u\rangle,$$

получаемый при действии оператора P_2 на произвольный вектор $|u\rangle$, несомненно принадлежит $\mathcal{E}_2$, ибо выражается в виде линейной комбинации векторов $|\xi\rangle$; напротив, разность $(1 - P_2)|u\rangle$ ортогональна каждому вектору последовательно сти $|\xi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \xi' | (1 - P_2) | u \rangle &= \\ &= \langle \xi' | u \rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2} \langle \xi' | \xi \rangle d\xi \langle \xi | u \rangle = \langle \xi' | u \rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2} \delta(\xi' - \xi) d\xi \langle \xi | u \rangle = 0 \end{aligned}$$

и, следовательно, ортогональна $\mathcal{E}_2$.

§ 11. Алгебра проекторов

Проекторы, действующие в пространстве Гильберта, имеют простой геометрический смысл и поэтому представляют большой интерес⁵⁾. Приведем здесь основные положения алгебры этих операторов. Ввиду того, что доказательства в большинстве случаев вполне элементарны, мы ограничимся указанием только принципа, оставляя читателю возможность провести рассуждения до конца.

Пусть P_i, P_j — операторы проектирования на подпространства $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j$ пространства Гильберта $\mathcal{E}$. Чтобы *произведение*

$$P_{[ij]} \equiv P_i P_j$$

также было оператором проектирования необходимо и достаточно, чтобы P_i и P_j коммутировали.

Условие это необходимо, ибо без него $P_{[ij]}$ не был бы эрмитовым оператором. Но оно и достаточно, так как в этом случае $P_{[ij]}$ эрмитов оператор, причем

$$P_{[ij]}^2 = P_i P_j P_i P_j = P_i^2 P_j^2 = P_i P_j = P_{[ij]}.$$

Соответствующее подпространство $\mathcal{E}_{[ij]}$ есть *пересечение* подпространств $\mathcal{E}_i$ и $\mathcal{E}_j$, т. е. подпространство векторов, общих для $\mathcal{E}_i$ и $\mathcal{E}_j$. Здесь возможны два крайних случая: тот, когда $\mathcal{E}_{[ij]}$ идентично одному из двух указанных подпространств, и тот, когда $\mathcal{E}_{[ij]}$ пусто. В первом случае, например, $\mathcal{E}_j$ является подпространством $\mathcal{E}_i$, во втором — подпространства $\mathcal{E}_i$ и $\mathcal{E}_j$ ортогональны.

Нетрудно, далее, доказать следующие два положения.

⁵⁾ Рассмотрение проблемы непрерывного спектра методом фон Неймана основано на систематическом изучении свойств проекторов в пространстве Гильберта; этот метод дает возможность преодолеть все трудности непрерывного спектра, не выходя из пространства Гильберта (см. книги, цитированные в списке V.³⁾).

Чтобы $\mathcal{E}_j$ было подпространством $\mathcal{E}_i$ (т. е. чтобы каждый вектор подпространства $\mathcal{E}_j$ был вектором подпространства $\mathcal{E}_i$) необходимо и достаточно, чтобы

$$P_i P_j = P_j.$$

Чтобы $\mathcal{E}_i$ и $\mathcal{E}_j$ были ортогональны, необходимо и достаточно выполнение равенства

$$P_i P_j = 0. \quad (40)$$

В этом случае говорят, что *проекторы ортогональны*.

Что касается *суммы проекторов*, то здесь мы имеем важную теорему:

Пусть $P_i, P_j, P_k, \dots$ операторы проектирования на подпространства $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j, \mathcal{E}_k, \dots$ соответственно. Чтобы их сумма $P_i + P_j + P_k + \dots$ также была оператором проектирования, необходимо и достаточно чтобы эти операторы были попарно ортогональны. Подпространство, на которое осуществляется проекция, есть в этом случае *прямая сумма*, или *объединение* подпространств $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j, \mathcal{E}_k, \dots$ (т. е. множество векторов, получаемое линейной суперпозицией векторов, принадлежащих каждому из этих подпространств).

Условие ортогональности, очевидно, достаточно. Чтобы доказать его необходимость, достаточно доказать его для случая сумм двух операторов $S = P_i + P_j$. Оператор S , очевидно, эрмитов. Чтобы выполнялось условие $S^2 = S$, необходимо, чтобы $P_i P_j + P_j P_i = 0$. Умножая это уравнение на P_i сначала слева, а потом справа, получаем

$$P_i P_j + P_i P_j P_i = P_i P_j P_i + P_i P_i = 0,$$

откуда

$$P_i P_j = P_j P_i = \frac{1}{2} (P_i P_j + P_j P_i) = 0.$$

Оператор P_1 из уравнения (37) является примером суммы ортогональных проекторов. Операторы проектирования $|m\rangle\langle m|$, фигурирующие в этой сумме, являются элементарными проекторами. Ясно, что пространство $\mathcal{E}_1$, на которое осуществляется проектирование, является объединением пространств, на которые проектируют отдельные операторы, входящие в сумму. Будучи объединением N одномерных пространств, пространство $\mathcal{E}_1$ имеет N измерений, а оператор P_1 является суммой N элементарных ортогональных проекторов.

Если $N \neq 1$, то P_1 представляется в этой форме бесчисленным числом способов. Действительно, обозначим символом $\{n\}$ последовательность $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$ из N ортонормированных векторов, принадлежащих $\mathcal{E}_1$. Последовательность $\{n\}$ образует базисную систему векторов в $\mathcal{E}_1$ в том смысле, что каждый вектор из $\mathcal{E}_1$ может быть линейно выражен через эти N векторов; условимся считать тождественными базисные системы, векторы

которых отличаются только фазовыми множителями или порядком расположения в последовательности. При этом очевидно, что

$$P_1 = \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n|$$

и существует столько выражений для P_1 , сколько существует различных базисных систем.

Эти рассуждения без труда обобщаются на случай, когда подпространство S , на которое осуществляется проектирование, обладает бесконечным числом измерений. В теории пространства Гильберта доказывается, что всегда можно сделать выбор в $\mathcal{E}$ (и бесчисленным числом способов) базисной системы $\{n\} \equiv |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$, содержащей бесконечную счетную последовательность ортонормированных векторов. Проектор P на S может быть представлен в виде ряда из элементарных ортогональных проекторов

$$P = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|.$$

Однако в S можно построить и базисную систему, содержащую кет-векторы, зависящие от непрерывного индекса. Предположим, например, что существует множество (бесконечное континуальное) векторов $|\xi\rangle$ с бесконечной нормой, зависящих от непрерывно изменяющегося индекса и удовлетворяющих условиям «ортонормированности» (38), и предположим также, что подпространство S образовано множеством векторов с конечной нормой, образованных путем линейной суперпозиции кет-векторов $|\xi\rangle$ из некоторой области (ξ_1, ξ_2) . В этом случае P можно также представить в виде (39):

$$P = \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle d\xi \langle \xi|.$$

В этой форме P все еще можно рассматривать как сумму ортогональных проекторов. Разделим область интегрирования (ξ_1, ξ_2) на некоторое число частичных областей. Тогда P есть сумма проекторов, полученных при интегрировании $|\xi\rangle d\xi \langle \xi|$ по каждой из этих частичных областей. Эти подобласти могут быть выбраны сколь угодно малыми. Обозначим символом δP оператор, полученный интегрированием по бесконечно малому интервалу $(\xi, \xi + d\xi)$:

$$\delta P = \int_{\xi}^{\xi + d\xi} |\xi'\rangle d\xi' \langle \xi'|,$$

тогда P есть сумма бесконечно большого числа операторов δP . Мы будем называть операторы типа δP *дифференциальными проекторами*; пространство проекции, соответствующее оператору этого типа, имеет бесконечное число измерений.

§ 12. Наблюдаемые, обладающие только дискретным спектром

Пусть A — эрмитов оператор. В этом параграфе мы рассмотрим проблему собственных значений, органичиваясь случаем, когда собственные векторы принадлежат пространству Гильберта. Собственные значения образуют дискретную последовательность $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$. Пусть $\mathcal{E}_n$ есть подпространство, принадлежащее собственному значению a_n , P_n — проектор на это подпространство. Если собственное значение a_n невырождено, то $\mathcal{E}_n$ имеет одно измерение и P_n — элементарный проектор. В противном случае всегда можно сделать выбор (и бесчисленным числом способов) базисной системы в $\mathcal{E}_n$: $|n1\rangle, |n2\rangle, \dots, |nr\rangle, \dots$, так, что

$$P_n = \sum_r |nr\rangle \langle nr|. \quad (41)$$

Подпространства, принадлежащие различным собственным значениям a_n, a'_n , ортогональны, следовательно

$$P_n P_{n'} = 0 \quad (n \neq n'). \quad (42)$$

Суммируя проекторы, принадлежащие всем собственным значениям дискретного спектра, получаем проектор

$$P_A \equiv \sum_n P_n, \quad (43)$$

подпространство проекции которого $\mathcal{E}_A$ есть объединение всех $\mathcal{E}_n$; $\mathcal{E}_A$ есть пространство векторов, образованных линейной суперпозицией кет-векторов A , принадлежащих пространству Гильберта.

Если A — наблюдаемая, имеющая только дискретный спектр, то $\mathcal{E}_A$, по определению, совпадает с полным пространством $\mathcal{E}$, иначе говоря

$$P_A \equiv \sum_n P_n = 1. \quad (44)$$

Иногда левую часть этого равенства называют *разложением единицы* по отношению к собственным значениям оператора A . Ясно, что это разложение единственно, т. е. что всякий кет-вектор $|u\rangle$ единственным образом может быть представлен в виде суммы собственных кет-векторов $|u_n\rangle$, каждый из которых

принадлежит одному определенному собственному значению. Чтобы написать эту сумму, достаточно применить к $|u\rangle$ каждый член равенства (44):

$$|u\rangle = \sum_n P_n |u\rangle. \quad (45)$$

Согласно определению P_n вектор $P_n |u\rangle$ либо равен нулю, либо есть собственный кет-вектор A , принадлежащий собственному значению a_n , причем это имеет место для любого кет-вектора $|u\rangle$; поэтому имеем

$$(A - a_n) P_n = 0. \quad (46)$$

Умножая почленно уравнение (44) на A , получим, принимая во внимание (46):

$$A = \sum_n a_n P_n. \quad (47)$$

Из этого равенства следует, что наблюдаемая A полностью определяется заданием ее собственных значений и соответствующих подпространств. Выражение (47) для оператора A показывает, кроме того, что оператор A коммутирует со всеми проекторами P_n .

Соотношения (44), (45), (47) характерны для наблюдаемых, обладающих только дискретным спектром, при этом число собственных значений может быть как конечным, так и бесконечным. Мы не будем исследовать здесь вопроса о сходимости соответствующих рядов, эта сходимость всегда имеется.

Особенно удобные выражения получаются, если всюду вместо P_n подставить выражение (41). Так, левая часть уравнения (44) выражается в виде суммы элементарных проекторов и мы получаем *соотношение замкнутости*

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle \langle nr| = 1. \quad (48)$$

Вместе с соотношениями ортонормированности

$$\langle nr | n'r' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{rr'} \quad (49)$$

это условие выражает тот факт, что множество кет-векторов $|nr\rangle$ образует полную ортонормированную систему.

Применяя оператор из (48) к некоторому вектору, получаем разложение

$$|u\rangle = \sum_{n,r} |nr\rangle \langle nr | u \rangle \quad (50)$$

в ряд по собственным векторам $|nr\rangle$. Коэффициенты разложения равны скалярным произведениям $\langle nr | u \rangle$ (ср. уравнения

(V.(14—15)). Кроме того

$$\langle u|u\rangle = \langle u|P_A|u\rangle = \sum_{n,r} \langle u|nr\rangle \langle nr|u\rangle = \sum_{n,r} |\langle nr|u\rangle|^2. \quad (51)$$

Норма $|u\rangle$ равна сумме квадратов модулей коэффициентов разложения: это есть равенство Парсеваля (ср. уравнение (V.16)).

Наблюдаемая A может быть представлена в виде ряда ортогональных элементарных проекторов. Производя те же операции, которые привели к уравнению (47), получаем

$$A = AP_A = \sum_{n,r} |nr\rangle a_n \langle nr|. \quad (52)$$

§ 13. Наблюдаемые в общем случае и обобщенное соотношение замкнутости

Эрмитов оператор A является наблюдаемой, если векторное пространство $\mathcal{E}_A$ с ограниченной нормой, образованное суперпозицией собственных векторов A , совпадает с полным пространством Гильберта $\mathcal{E}$ или, что то же самое, если оператор P_A проектирования на $\mathcal{E}_A$ равен единице.

Когда спектр полностью дискретен, оператор P_A может быть представлен в виде разложения по элементарным ортогональным проекторам, полученным с помощью собственных векторов A , и условие того, что A есть наблюдаемая, удобно записывать в форме соотношения замкнутости (48). Распространение этого соотношения на общий случай требует введения дифференциальных проекторов — они в случае непрерывного спектра играют ту же роль, что элементарные проекторы при дискретном спектре.

Рассмотрим сначала случай, когда спектр A невырожден. Предполагаем, что спектр содержит непрерывную область, обозначаемую непрерывно изменяющимся индексом ν , и дискретную область с дискретным индексом n . Таким образом, a_n есть собственное значение из дискретной части спектра, $a(\nu)$ — собственное значение из непрерывной части; $a(\nu)$ есть монотонная функция ν , принимающая все промежуточные значения в некотором интервале $(a(\nu_1), a(\nu_2))$. Обозначим с помощью $|n\rangle$ и $|\nu\rangle$ собственные кет-векторы, принадлежащие собственным значениям a_n и $a(\nu)$. Эти кет-векторы ортонормированы, в частности

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

Оператор

$$\delta P = \int_{\nu}^{\nu+\delta\nu} |\nu\rangle d\nu' \langle \nu'|$$

является оператором проектирования на подпространство, натянутое на кет-векторы $|\nu\rangle$ из интервала $(\nu, \nu + d\nu)$. Складывая проекторы этого типа, образуем проектор

$$P_c = \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle d\nu \langle \nu|,$$

который проектирует на подпространство $\mathcal{E}_c$, натянутое на собственные кет-векторы, принадлежащие непрерывному спектру. Это подпространство ортогонально подпространству $\mathcal{E}_d$, натянутому на собственные кет-векторы дискретного спектра, причем проектор на это подпространство равен

$$P_d = \sum_n |n\rangle \langle n|.$$

Условие того, что A есть наблюдаемая, записывается в виде

$$P_A \equiv P_c + P_d = 1$$

или подробнее

$$P_A \equiv \sum_n |n\rangle \langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle d\nu \langle \nu| = 1. \quad (53)$$

Выполнение соотношения замкнутости (53) является необходимым и достаточным условием того, что множество ортонормированных векторов $|n\rangle$, $|\nu\rangle$ образует полную систему.

Распространение этого результата на случай, когда весь спектр или часть спектра A оказываются вырожденными, не вызывает трудностей. Возьмем в качестве примера случай, рассмотренный в конце § 9. Собственные кет-векторы $|nr\rangle$, $|\nu pr\rangle$ удовлетворяют условиям ортонормированности (30). Если кроме того A есть наблюдаемая, т. е. собственные кет-векторы этого оператора составляют полную систему, то они удовлетворяют условию замкнутости

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle \langle nr| + \sum_r \int \int |\nu pr\rangle d\nu d\rho \langle \nu pr| = 1. \quad (54)$$

Как и в случае полностью дискретного спектра удобно использовать соотношение замкнутости при разложении произвольного вектора $|u\rangle$ пространства Гильберта в ряд по базисным кет-векторам наблюдаемой A . Для сокращения записи примем, что спектр A невырожден (соотношение (53)). Тогда

$$|u\rangle = P_A |u\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|u\rangle + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle d\nu \langle \nu|u\rangle. \quad (55)$$

Аналогично находим обобщенное равенство Парсеваля

$$\langle u | u \rangle = \langle u | P_A | u \rangle = \sum_n |\langle n | u \rangle|^2 + \int_{v_1}^{v_2} |\langle v | u \rangle|^2 dv \quad (56)$$

и разложение A в ряд по проекторам

$$A = AP_A = \sum_n |n\rangle a_n \langle n| + \int_{v_1}^{v_2} |v\rangle a(v) dv \langle v|. \quad (57)$$

В заключение укажем, что часто бывает удобно заменить условие ортонормированности собственных векторов непрерывного спектра на более общее условие

$$\langle v | v' \rangle = f(v) \delta(v - v'),$$

где $f(v)$ — вещественная положительная функция v . Это эквивалентно умножению каждого вектора на постоянную с модулем $\sqrt{f}$. В этом случае все предшествующее остается справедливым, но только во всех формулах $|v\rangle dv \langle v|$ следует заменить на $|v\rangle \frac{dv}{f(v)} \langle v|$. Аналогично, если условие нормировки (30в) заменить на

$$\langle v\rho r | v'\rho' r' \rangle = F_r(v, \rho) \delta(v - v') \delta(\rho - \rho') \delta_{rr'},$$

то выражение для P_A в соотношении замкнутости (54) получается путем деления подынтегрального выражения на $F_r(v, \rho)$.

§ 14. Функции наблюдаемых

Линейный оператор полностью определен, если известно его действие на векторы, составляющие полную ортонормированную систему собственных векторов; тогда его действие на любую линейную суперпозицию этих векторов получается непосредственно, если, конечно, выполняется условие сходимости в случае бесконечного ряда (условия сходимости уже рассматривались в гл. V). В частности, всякая функция $f(a)$ собственных значений наблюдаемой A позволяет определить линейный оператор $f(A)$ как функцию этой наблюдаемой. Действие $f(A)$ на собственный вектор $|a\rangle$ оператора A , принадлежащий значению a , по определению, есть

$$f(A) |a\rangle = f(a) |a\rangle. \quad (58)$$

Когда функция f выражается полиномом, это определение получается непосредственным применением правил алгебры операторов, но оно справедливо и в более общих случаях.

Из самого определения следует, что всякий собственный вектор A является собственным вектором $f(A)$. Обратно, если всякий собственный вектор наблюдаемой A есть также собственный вектор линейного оператора F , то этот оператор есть операторная функция A .

Это вполне очевидно, если все собственные значения оператора A невырождены. Поэтому рассмотрим некоторое вырожденное собственное значение и пусть $|a1\rangle$, $|a2\rangle$ суть два линейно независимых собственных вектора, принадлежащих этому собственному значению. По предположению они являются также собственными векторами F :

$$F|a1\rangle = f_a^{(1)}|a1\rangle, \quad F|a2\rangle = f_a^{(2)}|a2\rangle.$$

Всякая линейная комбинация данных двух векторов также является собственным вектором F

$$F(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle) = f_a^{(\lambda)}(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle),$$

следовательно,

$$\lambda_1(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(1)})|a1\rangle + \lambda_2(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(2)})|a2\rangle = 0$$

и поскольку $|a1\rangle$ и $|a2\rangle$ линейно независимы,

$$f_a^{(1)} = f_a^{(\lambda)} = f_a^{(2)}.$$

Таким образом, все собственные функции A , принадлежащие одному собственному значению a , являются собственными функциями F , принадлежащими одному собственному значению f : последнее есть некоторая функция a , т. е. $f(a)$; следовательно, действительно $F = f(A)$.

Всякая функция $f(A)$ наблюдаемой A может быть выражена, как и сама наблюдаемая A , в форме линейной комбинации элементарных или дифференциальных проекторов. Предположим для определенности, что A удовлетворяет уравнению (57). Тогда

$$f(A) = f(A)P_A = \sum_n |n\rangle f(a_n) \langle n| + \int_{\mathbf{v}} |\mathbf{v}\rangle f[a(\mathbf{v})] d\mathbf{v} \langle \mathbf{v}|. \quad (59)$$

В качестве примеров функций наблюдаемой A укажем проектор на подпространство некоторого собственного значения, проектор на пространство, натянутое на собственные вектора, принадлежащие собственным значениям, лежащим в некоторой области и т. п. Укажем также экспоненциальный оператор $e^{i\xi A}$ (ξ — заданная постоянная) и обратный оператор A^{-1} . Функция $e^{i\xi A}$ определена всегда, обратный оператор A^{-1} определен только, если среди собственных значений оператора A нет нулевого.

§ 15. Операторы, коммутирующие с наблюдаемой. Коммутирующие наблюдаемые

Операторные функции наблюдаемой A принадлежат, вообще говоря, к более широкому классу операторов, а именно *операторов, коммутирующих с A* . Действие таких операторов на собственные векторы A особенно просто. Действительно, если $|a\rangle$ есть собственный вектор

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

и если

$$[A, X] = 0,$$

то

$$0 = (AX - XA)|a\rangle = (A - a)X|a\rangle.$$

Таким образом $X|a\rangle$ есть собственный вектор A , принадлежащий тому же собственному значению (если только вектор не равен нулю).

Обратно, для того чтобы оператор X коммутировал с наблюдаемой A , достаточно, чтобы его действие на каждый вектор полной ортонормированной системы собственных векторов A давало вектор, также являющийся собственным вектором A , принадлежащим тому же собственному значению.

На самом деле если выполняется сказанное, то действие коммутатора $[A, X]$ на каждый вектор этой полной системы дает нуль, поэтому выполняется операторное равенство $[A, X] = 0$.

Все это применимо, конечно, и к *коммутирующим наблюдаемым*. Кроме того, все сказанное в гл. V (§§ 14, 15) относительно коммутирующих наблюдаемых, можно повторить здесь с некоторым изменением терминологии. Приведем еще раз основные результаты.

Базисной системой наблюдаемой мы называем всякую полную ортонормированную систему собственных векторов этой наблюдаемой, причем считаем тождественными системы, отличающиеся только фазовыми множителями при собственных векторах, порядком расположения векторов дискретного спектра и выбором непрерывных индексов в случае непрерывного спектра.

Имеем следующую важную теорему:

Если две наблюдаемые A и B коммутируют, то они обладают по крайней мере одной общей базисной системой, и обратно, если две наблюдаемые A и B обладают общей базисной системой, то они коммутируют.

Всякая функция $f(a, b)$ собственных значений двух коммутирующих наблюдаемых A и B позволяет определить линейный оператор $f(A, B)$ — функцию этих двух наблюдаемых с помощью естественного обобщения понятия операторной функции одной

наблюдаемой. Легко показать, что если каждый общий собственный вектор наблюдаемых A и B есть собственный вектор линейного оператора F , то последний есть некоторая операторная функция A и B .

Все это без труда обобщается на случай любого числа коммутирующих между собой наблюдаемых.

Наконец, говорят, что последовательность $A, B, C, \dots$ наблюдаемых составляет *полный набор коммутирующих наблюдаемых*, если эти наблюдаемые все коммутируют между собой и если их общая базисная система определяется единственным образом. Каждому множеству собственных значений $a, b, c, \dots$ соответствует один и только один общий собственный вектор (определенный с точностью до постоянного множителя). Этот вектор может рассматриваться как функция собственных значений $a, b, c, \dots$. Его обычно обозначают символом $|abc \dots\rangle$.

Раздел III. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

§ 16. Общее понятие о конечных матрицах

По определению матрица A типа $M \times N$ есть совокупность MN элементов A_{mn} ($m = 1, 2, \dots, M$; $n = 1, 2, \dots, N$), которые обычно располагают в виде прямоугольной таблицы с M строками и N столбцами

$$(A) \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & \dots & & \\ \vdots & & & \\ A_{M1} & \dots & & A_{MN} \end{bmatrix};$$

A_{mn} есть элемент матрицы, расположенный на пересечении m -й строки и n -го столбца.

Если $M = N$, то мы имеем *квадратную матрицу*, число ее строк и столбцов дает число измерений, или порядок матрицы. Если одно из двух целых чисел M или N равно 1, то элементы матрицы могут рассматриваться как компоненты вектора. Мы будем называть *правым вектором* матрицу с одним столбцом ($M = \text{размерности вектора}, N = 1$) и *левым вектором* — матрицу с одной строкой ($M = 1, N = \text{размерности вектора}$). Тогда *скаляр* есть матрица с $M = N = 1$.

Из матрицы A типа $M \times N$ можно получить новые матрицы с помощью некоторых *операций сопряжения*, именно:

а) *комплексно сопряженную матрицу* A^* — это матрица типа $M \times N$, элементы которой суть величины, комплексно сопряженные элементам матрицы A : $(A^*)_{kl} = A_{kl}^*$;

б) *транспонированную матрицу* $\tilde{A}$ — это матрица типа $N \times M$, получаемая перестановкой строк и столбцов: $(\tilde{A})_{kl} = A_{lk}$;

в) *эрмитово сопряженную матрицу* A^+ — это матрица типа $N \times M$, получаемая применением обеих указанных выше операций: $(A^+)_{kl} = A_{lk}^*$.

Комплексно сопряженный правый вектор есть правый вектор. Транспонированный правый вектор и эрмитово сопряженный правый вектор суть левые векторы и наоборот. Комплексно сопряженная, транспонированная и эрмитово сопряженная квадратные матрицы порядка N суть квадратные матрицы порядка N .

Определяют следующие *операции матричной алгебры*:

а) *умножение матрицы* A *на постоянную* c ; произведение cA есть матрица того же типа, что и A :

$$(cA)_{mn} = cA_{mn};$$

б) *сумма* $S = A + B$ *двух матриц одного типа*; S есть матрица того же типа, что A и B :

$$S_{mn} = A_{mn} + B_{mn};$$

в) *произведение (справа)* $P = AB$ *матрицы* B *типа* $M_B \times N_B$ *на матрицу* A *типа* $M_A \times N_A$, *причем число столбцов матрицы* A *должно быть равно числу строк матрицы* B : $N_A = M_B = K$. Это матрица типа $M_A \times N_B$, элементы которой даются формулой

$$P_{mn} = \sum_{k=1}^K A_{mk} B_{kn}.$$

Имеют место следующие равенства

$$(A + B)^* = A^* + B^*, \quad \overline{(A + B)} = \tilde{A} + \tilde{B}, \quad (A + B)^+ = A^+ + B^+.$$

$$(AB)^* = A^* B^*, \quad (\tilde{AB}) = \tilde{B} \tilde{A}, \quad (AB)^+ = B^+ A^+.$$

Отметим изменение порядка сомножителей в правых частях двух последних равенств.

Умножение слева N -мерного левого вектора на N -мерный правый вектор дает скаляр. Умножение слева N -мерного правого вектора на N -мерный левый вектор дает квадратную матрицу порядка N .

Другой важной операцией является *тензорное произведение* двух матриц. С помощью матрицы $A^{(1)}$ типа $M_1 \times N_1$ и матрицы $A^{(2)}$ типа $M_2 \times N_2$ можно образовать матрицу $A^{(12)} \equiv A^{(1)} \otimes A^{(2)}$ типа $M_1 M_2 \times N_1 N_2$. $M_1 M_2$ строк этой матрицы обозначаются двумя индексами m_1 и m_2 ($m_1 = 1, 2, \dots, M_1$, $m_2 = 1, 2, \dots, M_2$), $N_1 N_2$ столбцов матрицы обозначаются двумя индексами n_1 и n_2 ($n = 1, 2, \dots, N_1$, $n_2 = 1, 2, \dots, N_2$). При этом

$$A_{m_1 m_2; n_1 n_2}^{(12)} = A_{m_1 n_1}^{(1)} A_{m_2 n_2}^{(2)}.$$

§ 17. Квадратные матрицы

В этом параграфе мы дадим несколько определений и перечислим ряд свойств квадратных матриц.

В квадратной матрице A порядка N мы различаем N диагональных элементов A_{nn} ($n = 1, 2, \dots, N$) и недиагональные элементы A_{ki} ($k \neq i$). *Шпур* (или *след*) матрицы A есть сумма ее диагональных элементов:

$$\text{Sp } A \equiv \text{Tr } A \equiv \sum_n A_{nn}. \quad (60)$$

Детерминант или *определитель* матрицы A , $\det A$, есть детерминант, образованный таблицей ее элементов.

Единичная матрица I есть матрица, все диагональные элементы которой равны 1, а все недиагональные элементы равны нулю

$$i_{mn} = \delta_{mn}.$$

Произведение единичной матрицы на постоянную есть, по определению, *постоянная матрица*. *Диагональная матрица* есть матрица, все недиагональные элементы которой равны нулю.

Квадратная матрица является вещественной, симметричной или эрмитовой, если она равна своей комплексно сопряженной, своей транспонированной или своей эрмитово сопряженной, соответственно.

Сумма и произведение двух матриц порядка N всегда определены — это также матрицы порядка N . Сумма ассоциативна и коммутативна. Произведение ассоциативно, дистрибутивно по отношению к сумме, но не обязательно коммутативно. Алгебра матриц порядка N есть *некоммутативная алгебра*.

Чтобы матрица порядка N коммутировала со всеми матрицами порядка N необходимо и достаточно, чтобы она была постоянной (пропорциональной единичной) (задача 4). В частности, единичная матрица I такова, что

$$IA = AI = A \quad (61)$$

при любой матрице A .

Две диагональные матрицы всегда коммутируют. Чтобы матрица порядка N коммутировала со всеми диагональными матрицами порядка N необходимо и достаточно, чтобы она была диагональной (задача 4).

Шпур (или *след*) произведения ряда матриц *инвариантен относительно циклической перестановки сомножителей*

$$\text{Sp } ABC = \text{Sp } CAB. \quad (62)$$

Детерминант произведения матриц равен произведению детерминантов этих матриц

$$\det ABC = \det A \cdot \det B \cdot \det C. \quad (63)$$

Матрица B , по определению, является обратной к матрице A , если

$$AB = I \quad \text{и} \quad BA = I. \quad (64)$$

Впрочем, если выполняется одно из этих равенств, то другое выполняется также. Обратную матрицу обычно обозначают символом

$$B = A^{-1}.$$

Чтобы данная матрица A имела обратную необходимо и достаточно, чтобы детерминант матрицы был отличен от нуля: $\det A \neq 0$. Если $\det A = 0$, то матрица называется *сингулярной*.

Нетрудно проверить, что

$$(\tilde{A})^{-1} = (\widetilde{A^{-1}}), \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^*, \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^+$$

и что

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1}.$$

Матрица O называется *ортогональной*, если транспонированная матрица $\tilde{O}$ равна обратной

$$O\tilde{O} = \tilde{O}O = I.$$

Матрица U называется *унитарной*, если эрмитово сопряженная матрица U^+ равна обратной

$$UU^+ = U^+U = I.$$

Если мы умножим слева матрицу размерности N на правый N -мерный вектор, то получим правый N -мерный вектор. Если умножить справа матрицу размерности N на левый N -мерный вектор, то получим левый N -мерный вектор.

Особенно просто действие диагональной матрицы. Пусть

$$D_{mn} = d_m \delta_{mn}$$

суть элементы такой матрицы, а u_n — компоненты правого вектора u , тогда

$$(Du)_n = d_n u_n.$$

Аналогично, если v_n — компоненты левого вектора v , то

$$(vD)_n = v_n d_n.$$

Если матрица сингулярна, то существует по крайней мере один правый вектор u такой, что $Au = 0$, и обратно. Из этого факта вытекает важная теорема:

Пусть A и B две матрицы порядка N . Для того, чтобы существовал правый N -мерный вектор u , удовлетворяющий уравнению

$$Au = \lambda Bu,$$

необходимо и достаточно, чтобы постоянная λ являлась решением уравнения

$$\det(A - \lambda B) = 0.$$

В частности, если A есть матрица порядка N , то для того, чтобы существовал правый вектор u , удовлетворяющий уравнению

$$Au = \lambda u,$$

необходимо и достаточно, чтобы постоянная λ являлась решением уравнения

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Это алгебраическое уравнение порядка, не превосходящего N называется *секулярным уравнением*.

Аналогичные результаты имеют место для левых векторов.

Тензорное произведение двух матриц порядка N_1 и N_2 есть матрица порядка $N_1 N_2$. В частности, тензорное произведение единичных матриц $I^{(1)}$, $I^{(2)}$ также представляет собой единичную матрицу $I^{(12)}$ размерности $N_1 N_2$.

В качестве примера рассмотрим матрицы порядка 4, получающиеся в результате тензорного умножения матриц порядка 2 на матрицы порядка 2. В теории часто используются следующие матрицы второго порядка (матрицы Паули):

$$1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (65)$$

Всякая матрица второго порядка может быть представлена как линейная комбинация этих четырех эрмитовых матриц. Рассмотрим теперь матрицы Паули в другом двумерном пространстве:

$$1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Производя тензорное умножение матрицы типа (σ) на матрицу типа (ρ) , мы получим матрицу типа (4×4) . Дадим явное выражение нескольких матриц типа $(\rho\sigma)$:

$$\rho_1 \otimes \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\rho_1 \otimes \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\rho_3 \otimes 1^{(\sigma)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Полученные матрицы можно рассматривать как матрицы, принадлежащие одному из пространств, скажем пространству (ρ) , но тогда каждый элемент матрицы есть матрица из другого пространства: это выражено в средних частях равенств. Правые части равенства представляют матрицы в явном виде; если условиться отмечать строки (и столбцы) двумя индексами $m\rho n\sigma$, причем первый относится к составляющим пространства ρ , а второй — к составляющим пространства (σ) , то строки (и столбцы) располагаются в порядке: 11, 12, 21, 22.

Линейно комбинируя тензорные произведения матриц, получают квадратные матрицы с двойными индексами $A_{m_1 m_2; n_1 n_2}$ ($m_1, n_1 = 1, 2, \dots, N_1$; $m_2, n_2 = 1, 2, \dots, N_2$), размерности $N_1 N_2$. Как показывает рассмотренный пример, можно считать их матрицами типа (1), элементы которых суть матрицы типа (2). Суммируя диагональные элементы такой матрицы, получаем матрицу типа (2) в обычном смысле; по определению это частичный шпур в пространстве (1) исходной матрицы:

$$(\text{Sp}_1 A)_{m_2 n_2} \equiv \sum_{n_1=1}^{N_1} A_{n_1 m_2; n_1 n_2}. \quad (67)$$

Аналогично можно определить частичный шпур в пространстве (2). Очевидно, что

$$\text{Sp } A = \text{Sp}_2 (\text{Sp}_1 A) = \text{Sp}_1 (\text{Sp}_2 A), \quad (68)$$

и если матрица A есть тензорное произведение $A^{(1)} \otimes A^{(2)}$, то

$$\text{Sp } (A^{(1)} \otimes A^{(2)}) = (\text{Sp}_1 A^{(1)}) (\text{Sp}_2 A^{(2)}). \quad (69)$$

§ 18. Бесконечные матрицы

Большую часть результатов, относящихся к конечным матрицам, можно распространить и на бесконечные матрицы. В этом случае также строки и столбцы нумеруются одним или несколькими индексами, но эти индексы могут составлять бесконечное счетное множество или даже континуальное множество значений в некоторой области. Бесконечная матрица является квадратной, если ее строки и столбцы отмечаются одной системой индексов. При наличии только одного столбца мы имеем правый вектор, при наличии только одной строки — левый вектор.

Операции комплексного сопряжения, транспонирования и эрмитового сопряжения без изменений переносятся на случай бесконечных матриц. То же самое можно сказать относительно умножения на постоянную и операции суммирования. Что же касается умножения A на B , то подразумевается, естественно, что строки B и столбцы A отмечаются одной системой индексов. Если, кроме того, некоторые индексы являются непрерывными, суммирование должно быть заменено интегрированием. Предположим, например, что A и B являются квадратными матрицами, элементы которых зависят от некоторого непрерывного индекса q , изменяющегося в интервале (q_1, q_2) . Тогда элемент матрицы $P = AB$ выражается формулой

$$P(q; q') = \int_{q_1}^{q_2} A(q; q'') B(q''; q') dq''.$$

Произведение определено, конечно, только в том случае, если суммы и интегралы, входящие в формулу, сходятся.

Если отвлечься от проблем сходимости, то все результаты § 17, относящиеся к квадратным матрицам, переносятся без изменения на случай бесконечных матриц, за исключением понятия детерминанта. Следует уточнить только определение диагональной матрицы в случае непрерывно изменяющихся индексов и условия существования обратной матрицы.

По определению непрерывная матрица $D(q; q')$ диагональна, если она имеет форму

$$D(q; q') = d(q) \delta(q - q'), \quad (70)$$

где $d(q)$ есть произвольная функция индекса q . При этом оказываются справедливыми два основных характерных свойства диагональных матриц: их свойство коммутировать друг с другом и то свойство, что действие диагональной матрицы на вектор состоит в умножении каждой компоненты вектора на соответствующий диагональный элемент матрицы. Так, при действии

диагональной матрицы (70) на правый вектор g с компонентами $g(q)$ получается вектор $h = Dg$ с компонентами

$$h(q) = \int D(q; q') g(q') dq' = d(q) g(q).$$

Заметим, что непрерывная матрица $\delta'(q - q')$ не является диагональной.

Что же касается существования матрицы, обратной к данной, то, в противоположность случаю конечных матриц, выполнение условия

$$AB = I \quad (71a)$$

не влечет за собой, вообще говоря, выполнения равенства

$$BA = I. \quad (71b)$$

Для утверждения, что матрицы A и B обратны друг другу, требуется одновременное выполнение равенств (71a, б).

Для того чтобы матрица A имела обратную, вовсе не обязательно, чтобы она была квадратной. Например, возможен случай, когда строки матрицы A нумеруются дискретным индексом, а столбцы — непрерывным, и тем не менее она имеет обратную матрицу; в этом случае обратная матрица A^{-1} будет иметь дискретным индекс столбца и непрерывным — индекс строки. В частном случае унитарной матрицы U , которая, по определению, удовлетворяет двум уравнениям

$$UU^{\dagger} = I, \quad U^{\dagger}U = I, \quad (72)$$

индексы строк и столбцов не обязательно имеют одинаковую природу. Однако единичные матрицы, стоящие в правых частях этих равенств, necessarily являются квадратными матрицами. Если матрица U не квадратна, то системы индексов единичных матриц в правых частях (72) различны.

§ 19. Представление векторов и операторов матрицами

Рассмотрим векторное пространство $\mathcal{S}$ и выберем в этом пространстве полную ортонормированную систему векторов; эта система может, вообще говоря, состоять из собственных векторов полного набора коммутирующих наблюдаемых. Для краткости будем использовать в рассуждениях базисную систему с дискретным индексом n . Предположим, например, что мы имеем дело с собственными векторами некоторой наблюдаемой Q

$$Q|n\rangle = q_n|n\rangle.$$

Будем говорить, что это базисные векторы в представлении $\{Q\}$.

Эти векторы образуют полную ортонормированную систему:

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \quad (73)$$

$$P_Q \equiv \sum_n |n\rangle \langle n| = 1. \quad (74)$$

Уравнения (73) и (74) являются основными уравнениями представления $\{Q\}$.

Для всякого кет-вектора $|u\rangle$ имеем

$$|u\rangle = P_Q |u\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | u \rangle.$$

Величины $u_n = \langle n | u \rangle$ можно рассматривать как элементы матрицы с одним столбцом, причем n есть индекс, нумерующий строки. Задание этого правого вектора полностью определяет кет-вектор $|u\rangle$: это матрица, представляющая $|u\rangle$ в представлении $\{Q\}$.

Для всякого бра-вектора $\langle v |$ имеем

$$\langle v | = \langle v | P_Q = \sum_n \langle v | n \rangle \langle n |.$$

Величины $\langle v | n \rangle$ являются комплексно сопряженными по отношению к компонентам v_n правого вектора, представляющего кет-вектор $|v\rangle$ в представлении $\{Q\}$. Они могут рассматриваться также как компоненты левого вектора; задание этого левого вектора полностью определяет бра-вектор $\langle v |$: это вектор, представляющий $\langle v |$ в представлении $\{Q\}$. Таким образом, бра-вектор, сопряженный данному кет-вектору, представляется вектором, эрмитово сопряженным вектору, представляющему кет-вектор.

Всякий линейный оператор A может быть единственным образом представлен в виде двойного ряда по базисным операторам $|m\rangle \langle n|$:

$$A = P_Q A P_Q = \sum_{m, n} |m\rangle \langle m | A | n \rangle \langle n |.$$

Коэффициенты разложения $A_{mn} = \langle m | A | n \rangle$ полностью определяют A и могут рассматриваться как элементы квадратной матрицы, причем m есть индекс строки, а n — индекс столбца: это матрица, представляющая оператор A в представлении $\{Q\}$.

Установив таким образом взаимоднозначное соответствие между векторами и операторами, с одной стороны, и матрицами — с другой стороны, выясним теперь, каким образом каждая операция с операторами и векторами в пространстве $\mathcal{E}$ переводится на язык представляющих их матриц.

Соотношения сопряжения между векторами и операторами соответствуют соотношения эрмитового сопряжения между мат-

рицами. Мы это уже отмечали на примере сопряжения между бра- и кет-векторами. Подобно этому матрицы, представляющие два эрмитово сопряженных оператора A и $A^\dagger$, сами эрмитово сопряжены: их элементы удовлетворяют соотношениям

$$A_{mn}^\dagger \equiv \langle m | A^\dagger | n \rangle = \langle n | A | m \rangle^* = A_{nm}^*.$$

Что же касается различных алгебраических операций с векторами и операторами, то им соответствуют различные операции матричной алгебры. Чтобы убедиться в этом, следует рассмотреть каждую из элементарных операций, упомянутых в двух предшествующих параграфах.

Наиболее просто дело обстоит в случае умножения на постоянную и операции суммирования; так, всякой линейной комбинации $\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2$ двух операторов соответствует та же линейная комбинация двух представляющих матриц:

$$\langle m | (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2) | n \rangle = \lambda_1 \langle m | A_1 | n \rangle + \lambda_2 \langle m | A_2 | n \rangle.$$

Различные произведения векторов и операторов представляются произведениями соответствующих матриц. Именно:

а) скалярное произведение $|u\rangle$ на $|v\rangle$:

$$\langle v | u \rangle = \langle v | P_Q | u \rangle = \sum_n \langle v | n \rangle \langle n | u \rangle = \sum_n v_n^* u_n;$$

таким образом, $\langle v | u \rangle$ равно произведению (справа) матрицы (правого вектора), представляющей $|u\rangle$, на матрицу, эрмитово сопряженную матрице, представляющей $|v\rangle$;

б) действие оператора A на кет-вектор $|u\rangle$ или бра-вектор $\langle v|$:

$$\langle n | A | u \rangle = \langle n | A P_Q | u \rangle = \sum_k \langle n | A | k \rangle \langle k | u \rangle,$$

$$\langle v | A | n \rangle = \langle v | P_Q A | n \rangle = \sum_l \langle v | l \rangle \langle l | A | n \rangle,$$

Матрица (правый вектор), представляющая $A | u \rangle$, есть произведение (справа) матрицы, представляющей $|u\rangle$, на матрицу, представляющую A . Матрица (левый вектор), представляющая $\langle v | A$, есть произведение (слева) матрицы, представляющей $\langle v|$, на матрицу, представляющую A ;

в) произведение AB :

$$\langle m | AB | n \rangle = \langle m | A P_Q B | n \rangle = \sum_k \langle m | A | k \rangle \langle k | B | n \rangle;$$

матрица, представляющая AB , выражается в виде произведения (справа) матрицы, представляющей B , на матрицу, представляющую A ;

г) оператор $|u\rangle\langle v|$: (m, n) — элемент матрицы, представляющей этот оператор, есть $\langle m|u\rangle\langle v|n\rangle$; искомая матрица, следовательно, получается при умножении (справа) матрицы (левый вектор), представляющей $\langle v|$, на матрицу (правый вектор), представляющую $|u\rangle$ (это дает квадратную матрицу).

Таким образом, определено представление векторов и операторов из пространства $\mathcal{E}$ матрицами, причем установлены простые правила соответствия между различными действиями с векторами и операторами и действиями с матрицами. Любую геометрическую задачу в пространстве $\mathcal{E}$ можно решать либо чисто геометрическими методами, рассматривая векторы и операторы, о которых идет речь, либо методами алгебры и анализа, оперируя с матрицами в подходящем представлении.

В последнем случае соответствующий выбор представления может привести к упрощению задачи, подобно тому как подходящий выбор системы координат позволяет упростить решение задачи в аналитической геометрии. На практике следует выбирать представление, в котором данные векторы и операторы представляются матрицами наиболее простой формы.

Заметим в этой связи, что в представлении $\{Q\}$ наиболее простой вид имеет наблюдаемая Q : она представляется диагональной матрицей. Вообще всякая функция $f(Q)$ в этом представлении выражается диагональной матрицей

$$\langle m|f(Q)|n\rangle = f(q_n)\delta_{mn}.$$

Операторы, коммутирующие с Q , также представляются простыми матрицами. Действительно, если $[X, Q] = 0$, то

$$(q_n - q_m)\langle m|X|n\rangle = 0$$

и поэтому $\langle m|X|n\rangle = 0$ для всякой пары индексов (m, n) таких, что $q_m \neq q_n$. Иными словами, все элементы матрицы, индекс строки и индекс столбца которых относятся к различным собственным значениям Q , равны нулю (ср. § 15).

Все результаты без труда распространяются на всякое пространство $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$, получающееся путем тензорного умножения пространств $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$. Векторы и операторы, образованные тензорным умножением, могут быть представлены матрицами, которые являются тензорными произведениями матриц, представляющих векторы и операторы пространств $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$.

§ 20. Преобразования матриц

Рассмотрим вновь матрицы конечного порядка. Будем обозначать прописной буквой квадратные матрицы порядка N , а строчной буквой — N -мерные векторы (правые и левые). Пусть T — несингулярная матрица (T^{-1} существует). Эта матрица

позволяет определить преобразование подобия матрицы A по формуле

$$A' = TAT^{-1}. \quad (75)$$

Соответствие между A и A' взаимнооднозначно; матрица A получается из A' в результате обратного преобразования

$$A = T^{-1}A'T. \quad (76)$$

Такое преобразование сохраняет след (шпур) и детерминант матрицы

$$\text{Sp } A = \text{Sp } A', \quad \det A = \det A' \quad (77)$$

(это следует непосредственно из указанных выше свойств шпура и детерминанта произведения матриц). Равным образом очевидно, что такое преобразование сохраняет всякое алгебраическое соотношение между матрицами. Если, например, мы имеем

$$A = \lambda BC + \mu DEF,$$

то умножая почленно слева на T и справа на T^{-1} и вставляя там, где это нужно, произведение $T^{-1}T$, получим

$$TAT^{-1} = \lambda TBT^{-1}TCT^{-1} + \mu TDT^{-1}TET^{-1}TFT^{-1},$$

т. е.

$$A' = \lambda B'C' + \mu D'E'F'.$$

Аналогично можно определить преобразование правого вектора u

$$u' = Tu, \quad u = T^{-1}u' \quad (78)$$

и левого вектора v

$$v' = vT^{-1}, \quad v = v'T. \quad (79)$$

Нетрудно проверить, что указанное преобразование в самом общем случае сохраняет все алгебраические уравнения, в которые входят квадратные матрицы и векторы обоих типов. Заметим также, что если c — произвольная постоянная, то квадратная матрица преобразуется с помощью T и cT одинаково; правый вектор при этом умножается на c , а левый — на $1/c$.

В то же время это преобразование в общем случае не сохраняет соотношений сопряженности между матрицами (задача 5). Посмотрим, например, какому условию должна удовлетворять матрица T , чтобы преобразование сохраняло эрмитовую сопряженность. Чтобы из $A' = TAT^{-1}$ следовало

$$A'^{\dagger} = TA^{\dagger}T^{-1},$$

какой бы ни была матрица A , необходимо, чтобы

$$TAT^{-1} = (TA^{\dagger}T^{-1})^{\dagger} = (T^{-1})^{\dagger}A^{\dagger},$$

или, если умножить равенство слева на T^+ и справа на T ,

$$T^+TA = AT^+T.$$

Необходимо, следовательно, чтобы матрица T^+T коммутировала со всеми матрицами A , т. е. чтобы она была единичной с точностью до постоянного множителя

$$T^+T = cI.$$

Далее, для того чтобы из $u' = Tu$ следовало $u'^+ = u^+T^{-1}$ при любом u необходимо, чтобы $u = T^+Tu$ при любом u , т. е. $c = 1$. Это значит, что матрица T должна быть унитарной. Очевидно, что это условие, необходимое для сохранения условия эрмитовой сопряженности, является также и достаточным.

Преобразование, матрица которого является унитарной, называется *унитарным преобразованием*. Поскольку в этом случае $U^{-1} = U^+$ преобразования матрицы A , правого вектора u и левого вектора v выражаются формулами:

$$\begin{aligned} A' &= UAU^+, & A &= U^+A'U, \\ u' &= Uu, & u &= U^+u', \\ v' &= vU^+, & v &= v'U. \end{aligned} \quad (80)$$

Как и всякое преобразование подобия, *унитарное преобразование сохраняет след и детерминант матриц и все алгебраические уравнения между матрицами и векторами. Но, кроме этого, оно сохраняет и эрмитово сопряжение.*

Далее, имеют место две следующие фундаментальные теоремы, которые мы приведем без доказательства.

А) *Всякая эрмитова матрица H может быть приведена к диагональному виду с помощью унитарного преобразования*

$$H' = UHU^+, \quad H' \text{ — диагональная.}$$

Диагональные элементы H' суть «собственные значения» H . Все они вещественны (H' — эрмитова матрица) и являются решениями секулярного уравнения

$$\det(H - xI) = 0.$$

Б) *Чтобы две эрмитовы матрицы H, K могли быть одновременно приведены к диагональному виду с помощью одного унитарного преобразования необходимо и достаточно, чтобы они коммутировали.*

Все эти определения и свойства, относящиеся к матрицам конечного порядка, без труда распространяются на случай бесконечных матриц. Всякая бесконечная матрица T , обладающая обратной матрицей T^{-1} , определяет преобразование подобия

квадратных матриц и векторов (правых и левых) при выполнении условий сходимости соответствующих сумм и интегралов. В противоположность случаю конечных матриц нет необходимости, чтобы T была обязательно квадратной матрицей. Конечно, строки и столбцы матрицы (квадратной), подвергающейся преобразованию, должны нумероваться той же системой индексов, что и столбцы T , а также компоненты правых и левых векторов. Но строки и столбцы преобразованной матрицы и компоненты преобразованных векторов нумеруются той системой индексов, которой нумеруются строки T .

Свойства сохранения следа (при условии его сходимости), алгебраических уравнений и эрмитового сопряжения (для унитарных матриц преобразования) справедливы и для бесконечных матриц. Что же касается фундаментальных теорем о диагонализации эрмитовых матриц унитарным преобразованием, то они не справедливы для всех эрмитовых матриц, но мы будем предполагать, что они выполняются в рассматриваемых нами случаях.

§ 21. Смена представления

Вернемся к проблеме матричного представления операторов и векторов векторного пространства $\mathcal{E}$. Каждой базисной системе векторов в этом пространстве соответствует некоторое представление. Следует научиться переходить от одного такого представления к другому. Имеются в виду, конечно, различные представления одного и того же вектора или оператора. Мы увидим, что переход от одного представления к другому совершается с помощью унитарного преобразования.

Возьмем для определенности две базисные системы: одну, образованную собственными векторами $|n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, \infty$) наблюдаемой Q из § 19, и вторую, образованную собственными векторами $|\xi\rangle$ другой наблюдаемой E , спектр которой будем предполагать непрерывным. Две эти системы определяют представления $\{Q\}$ и $\{E\}$. Основные уравнения представления $\{Q\}$ уже были выписаны ранее (уравнения (73) и (74)). Аналогичные уравнения для представления $\{E\}$ записываются в форме

$$\langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi'), \quad (81)$$

$$P_E \equiv \int |\xi\rangle d\xi \langle \xi| = 1. \quad (82)$$

Базисные векторы одного представления могут быть разложены по базисным векторам другого представления в виде

$$|n\rangle = \int |\xi\rangle d\xi \langle \xi | n \rangle, \quad |\xi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \xi \rangle. \quad (83)$$

Скалярное произведение $\langle \xi | n \rangle$, фигурирующее в качестве коэффициента разложения $|n\rangle$, может рассматриваться как элемент $S(\xi; n)$ матрицы S , причем ξ есть индекс строки, а n — индекс столбца; скалярное произведение $\langle n | \xi \rangle$ во втором разложении может рассматриваться как элемент $T(n; \xi)$ матрицы T , причем n есть индекс строки, а ξ — индекс столбца. Впрочем, поскольку $\langle \xi | n \rangle = \langle n | \xi \rangle^*$, имеем

$$T = S^\dagger.$$

Кроме того,

$$\sum_n \langle \xi | n \rangle \langle n | \xi' \rangle = \langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi'),$$

$$\int \langle n | \xi \rangle d\xi \langle \xi | n' \rangle = \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}.$$

Иначе говоря,

$$SS^\dagger = I, \quad (84a)$$

$$TT^\dagger = S^\dagger S = I, \quad (84b)$$

матрица S унитарна.

Удобно обозначить символом $(u)_Q$ правый вектор с компонентами $\langle 1 | u \rangle$, $\langle 2 | u \rangle$, ..., представляющий кет-вектор $|u\rangle$ в представлении $\{Q\}$, и символом $(u)_E$ правый вектор с компонентами $\langle \xi | u \rangle$, представляющий тот же вектор $|u\rangle$ в представлении $\{E\}$. Применяя соотношение (74), имеем

$$\langle \xi | u \rangle = \sum_k \langle \xi | k \rangle \langle k | u \rangle;$$

другими словами,

$$(u)_E = S(u)_Q. \quad (85)$$

Обозначим также с помощью $(A)_Q$ и $(A)_E$ матрицы, соответствующие заданному оператору A в представлениях $\{Q\}$ и $\{E\}$; тогда

$$\langle \xi | A | \xi' \rangle = \sum_{k, l} \langle \xi | k \rangle \langle k | A | l \rangle \langle l | \xi' \rangle$$

или

$$(A)_E = S(A)_Q S^\dagger. \quad (86)$$

Аналогично для левых векторов $(v)_Q$ и $(v)_E$, представляющих один и тот же бра-вектор $\langle v |$, имеем

$$(v)_E = (v)_Q S^\dagger. \quad (87)$$

Уравнения (85), (86), (87) являются искомыми уравнениями, характеризующими унитарное преобразование S (ср. формулы (80)).

Таким образом, переход от представления $\{Q\}$ к представлению $\{E\}$ осуществляется при помощи унитарного преобразования S .

Элементы полученной матрицы S обладают следующими замечательными свойствами:

— рассматриваемые как функции индекса столбца n элементы $\langle \xi | n \rangle$ ξ -й строки являются компонентами левого вектора $(\xi)_Q$, представляющего собственный бра-вектор $\langle \xi |$ оператора E в представлении $\{Q\}$;

— рассматриваемые как функции индекса строки ξ элементы $\langle \xi | n \rangle$ n -го столбца являются компонентами правого вектора $(n)_E$, представляющего собственный кет-вектор $|n\rangle$ оператора Q в представлении $\{E\}$.

В частности, решение в представлении $\{Q\}$ проблемы собственных значений оператора E есть задача, математически эквивалентная нахождению преобразования S , диагонализующего матрицу $(E)_Q$. Аналогично решение в представлении $\{E\}$ проблемы собственных значений оператора Q эквивалентно нахождению преобразования S^+ , диагонализующего матрицу $(Q)_E$.

Важно выделить те величины и те соотношения, которые могут быть определены независимо от вида представления. Этим качеством обладают величины и соотношения, определяемые непосредственно с помощью векторов и операторов. Так, *скалярное произведение* двух векторов есть величина, инвариантная относительно изменения представления. *Соотношения эрмитового сопряжения* и все *алгебраические уравнения* между векторами и между операторами также обладают этим свойством инвариантности.

Отметим еще *сохранение следа*: след (если он сходится) матрицы, представляющей оператор, сохраняет свое значение независимо от выбранного представления; эта величина характеризует сам оператор. Нетрудно показать, что (задача 6)

$$\text{Sp} |u\rangle \langle u| = \langle u | u \rangle, \quad (88)$$

$$\text{Sp} |u\rangle \langle v| = \langle v | u \rangle. \quad (89)$$

§ 22. Унитарные преобразования операторов и векторов

Матрица S , введенная в предшествующем параграфе, не представляет никакого оператора. Матрица, представляющая некоторый оператор, определена в заданном представлении, в то время как матрица преобразования зависит как бы сразу от двух представлений. Это хорошо видно на примере, разобранном выше, ибо матрица S не является квадратной.

Тем не менее в некоторых случаях может оказаться, что существует взаимоднозначное соответствие между базисными

векторами двух разных представлений. В этом случае векторы обеих базисных систем нумеруются одной системой индексов. Рассмотрим, например, представление $\{Q\}$ с базисной системой $|n\rangle$, нумеруемой дискретным индексом n , и представление $\{\bar{Q}\}$ с базисной системой $|\bar{n}\rangle$, нумеруемой тем же самым индексом. Два кет-вектора $|n\rangle$ и $|\bar{n}\rangle$, нумеруемые одним индексом, как-то соответствуют один другому. Пусть это соответствие выражается оператором U :

$$|n\rangle = U|\bar{n}\rangle.$$

Тогда

$$U = U \left(\sum_n |\bar{n}\rangle \langle \bar{n}| \right) = \sum_n |n\rangle \langle \bar{n}| \quad (90)$$

и

$$U^\dagger = \sum_n |\bar{n}\rangle \langle n|;$$

поэтому, учитывая условия ортонормированности $|n\rangle$ и $|\bar{n}\rangle$, получаем

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1. \quad (91)$$

Следовательно, U есть *унитарный оператор*. Вообще же унитарная матрица $\langle \bar{m}|n\rangle$, определяющая переход от представления $\{Q\}$ к представлению $\{\bar{Q}\}$, есть матрица, представляющая U в представлении $\{\bar{Q}\}$.

В том случае когда можно построить унитарный оператор U , можно определить операцию, которая является в некотором смысле дополнительной к операции изменения представления. Вместо того чтобы преобразовывать базисную систему $\{Q\}$ в новую базисную систему $\{\bar{Q}\}$, векторы которой даются уравнением

$$|\bar{n}\rangle = U^\dagger |n\rangle, \quad (92)$$

можно осуществить преобразование самих векторов и операторов пространства $\mathcal{E}$, поставив в соответствие каждому вектору $|u\rangle$ вектор $|\hat{u}\rangle = U|u\rangle$, а каждому оператору A — оператор $\hat{A} = UAU^\dagger$.

Ввиду того что оператор U унитарен, очевидно, что преобразование U сохраняет соотношения сопряжения и уравнения между векторами и операторами. В частности:

- а) сохраняется скалярное произведение: $\langle \hat{u}|\hat{A}|\hat{v}\rangle = \langle u|A|v\rangle$;
- б) сохраняется эрмитовость.

Если A — наблюдаемая, то $\hat{A}$ есть наблюдаемая с тем же спектром собственных значений, ибо уравнение на собственные значения

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

переходит в уравнение

$$\hat{A}|\hat{a}\rangle = a|\hat{a}\rangle. \quad (93)$$

Собственные кет-векторы $\hat{A}$, принадлежащие заданному собственному значению a , являются преобразованными собственными кет-векторами A , принадлежащими тому же собственному значению. Заметим, что матрица, представляющая $\hat{A}$ в $\{Q\}$, совпадает с той, которая представляет A в $\{Q\}$. Аналогично вектор $|\hat{a}\rangle$ имеет в $\{Q\}$ те же компоненты, что и вектор $|a\rangle$ в $\{Q\}$.

Произвести последовательно два преобразования с операторами U и V значит то же самое, что произвести одно преобразование с оператором $W = VU$. Поскольку оператор W унитарен, результирующее преобразование будет унитарным. Иными словами, *произведение двух унитарных преобразований есть унитарное преобразование.*

Если оператор U , определяющий унитарное преобразование, «бесконечно близок» единице, то преобразование называется *инфинитезимальным*. Оператор U принимает вид

$$U \equiv 1 + i\varepsilon F, \quad (94)$$

где ε есть бесконечно малое вещественное число. Условие унитарности (91) принимает вид

$$(1 - i\varepsilon F^\dagger)(1 + i\varepsilon F) = (1 + i\varepsilon F)(1 - i\varepsilon F^\dagger) = 1$$

или, сохраняя только члены первого порядка по ε , $F = F^\dagger$.

Следовательно, оператор F эрмитов.

При инфинитезимальном преобразовании векторы и операторы преобразуются по формулам

$$|\hat{u}\rangle \equiv |u\rangle + \delta|u\rangle = (1 + i\varepsilon F)|u\rangle,$$

$$\hat{A} \equiv A + \delta A = (1 + i\varepsilon F) A (1 - i\varepsilon F) = A + i\varepsilon [F, A]$$

или

$$\delta|u\rangle = i\varepsilon F|u\rangle, \quad (95)$$

$$\delta A = i\varepsilon [F, A]. \quad (96)$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть заданы два проектора P_i, P_j . По определению P_i не превосходит P_j , если $P_i P_j = P_i$; при этом пишут $P_i \leq P_j$. Показать, что если $P_i \leq P_j$, то $\langle u|P_i|u\rangle \leq \langle u|P_j|u\rangle$ при любом $|u\rangle$, и обратно. Показать либо непосредственно, либо используя это последнее свойство, что установленное неравенство действительно удовлетворяет аксиомам неравенств, а именно: а) если $P_i \leq P_j$ и $P_j \leq P_k$, то $P_i \leq P_k$; б) если $P_i \leq P_j$ и $P_i \leq P_k$, то $P_i \leq P_k$.

2. Пусть $P_1, P_2, \dots, P_K$ — проекторы. Показать, что их сумма также является проектором в том и только том случае, если

$$\sum_{i=1}^K \langle u|P_i|u\rangle \leq \langle u|u\rangle$$

для каждого вектора $|u\rangle$ в пространстве Гильберта.

3. а) Наблюдаемая A обладает конечным числом N собственных значений. Обозначим эти собственные значения буквами $a_1, a_2, \dots, a_N$ и положим

$$f(A) \equiv (A - a_1)(A - a_2) \dots (A - a_N) \equiv (A - a_n)g_n(A)$$

Показать, что $f(A) = 0$ и что оператор проектирования P_n на подпространство n -го собственного значения дается выражением

$$P_n = g_n(A)/g_n(a_n)$$

б) Доказать обратное свойство, а именно: если A есть эрмитов оператор, удовлетворяющий алгебраическому уравнению порядка N

$$f(A) \equiv (A - a_1)(A - a_2) \dots (A - a_N) = 0,$$

и если он не удовлетворяет никакому другому алгебраическому уравнению более низкого порядка, то это наблюдаемая, обладающая N собственными значениями, которые суть корни (обязательно вещественные и различные) уравнения $f(x) = 0$.

4. Показать, что матрица порядка N :

а) есть матрица, кратная единичной, если она коммутирует со всеми матрицами порядка N ;

б) есть диагональная матрица, если она коммутирует со всеми диагональными матрицами порядка N .

5. Показать, что:

а) для того чтобы преобразование сохраняло комплексную сопряженность матриц необходимо и достаточно, чтобы матрица преобразования была вещественной;

б) для того чтобы преобразование сохраняло транспонированность матриц необходимо и достаточно, чтобы матрица преобразования была ортогональной.

6. Пусть $|u\rangle$ и $|v\rangle$ — два вектора с конечной нормой. Показать, что

$$\text{Sp}|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle, \quad \text{Sp}|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle.$$

7. Пусть H есть положительно определенный эрмитов оператор. Показать, что при любых $|u\rangle$ и $|v\rangle$

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leq \langle u|H|u\rangle\langle v|H|v\rangle,$$

и что равенство $\langle u|H|u\rangle = 0$ необходимо влечет за собой $H|u\rangle = 0$. Показать, кроме того, что $\text{Sp} H \geq 0$, причем знак равенства реализуется только, если $H = 0$.

8. Показать, что если H и K являются двумя положительно определенными наблюдаемыми, то $\text{Sp} HK \geq 0$, а равенство влечет за собой $HK = 0$.

9. Пусть A — некоторый линейный оператор. Показать, что A^+A есть положительно определенный эрмитов оператор и его след равен сумме квадратов модулей элементов матрицы, представляющей A в некотором произвольно выбранном представлении. Вывести отсюда, что $\text{Sp} A^+A \geq 0$, а равенство выполняется только, если $A = 0$.

§ 1 Введение

В классической физике динамическое состояние физической системы в каждый момент времени определено, если известны значения динамических переменных, характеризующих систему. Эти значения могут быть в принципе определены все одновременно с любой степенью точности. Поэтому задачей классической теории является определение динамических переменных физической системы и исследование уравнений движения, которым они подчиняются.

В квантовой теории соответствие между динамическим состоянием и динамическими переменными оказывается далеко не столь прямым. В процессе измерения какой-либо динамической переменной динамическое состояние системы изменяется под воздействием измерительного прибора. Если в классической физике этим изменением обычно пренебрегают, то на микроскопическом уровне этого сделать уже нельзя; модификация состояния системы предстает как непредсказуемое и неконтролируемое возмущение, ограничивающее возможность одновременного измерения всех динамических переменных. Поэтому приходится отказаться от основного постулата классической физики о том, что различные физические величины, характеризующие систему, могут в любой момент времени принимать вполне определенные значения. Для каждой из этих величин можно указать только *статистическое распределение* значений, выражающее вероятность того или иного результата в случае возможного измерения.

Согласно установившейся терминологии (§ IV. 17) говорят, что динамические переменные квантовой системы не все попарно совместны. Однако к заданной динамической переменной можно присовокупить некоторое число других, пока не образуется *полный набор совместных динамических переменных*. По определению все члены такого набора совместны друг с другом, но вне набора не существует динамических переменных, совместных с каждым членом набора, кроме, конечно, каких-либо функций от переменных — членов набора. Точное измерение динамических переменных полного набора дает наиболее пол-

ную информацию, какую только можно иметь относительно динамического состояния физической системы. Таким образом, динамическое состояние квантовой системы определяется не заданием всех динамических переменных, присущих системе (как в классической теории), но заданием тех из них, которые входят в какой-либо полный набор совместных переменных.

В качестве основного принципа принимается, что динамические состояния квантовой системы допускают *линейную суперпозицию*. В согласии с этим принципом (см. § VII.1) квантовой системе сопоставляется некоторое векторное пространство $\mathcal{E}$, так что каждое динамическое состояние представляется вектором в этом пространстве. Предполагается, кроме того, что $\mathcal{E}$ есть пространство Гильберта. В дальнейшем мы используем обозначения и свойства пространства Гильберта, как они были изложены в гл. VII. Таким образом, каждому динамическому состоянию соответствует некоторый кет-вектор $|u\rangle$ пространства $\mathcal{E}$. В то же время каждой динамической переменной сопоставляется некоторая наблюдаемая, действующая в пространстве $\mathcal{E}$ ¹⁾. Если динамические переменные совместны, соответствующие им наблюдаемые коммутируют, если переменные несовместны, наблюдаемые не коммутируют.

Общий формализм квантовой теории основан на указанном соответствии между динамическими состояниями и векторами, физическими величинами и операторами. В разделе I мы уточним это соответствие, покажем, как строить пространство Гильберта, и какой физический смысл имеют векторы и операторы из этого пространства. Далее, в разделе II общая теоретическая схема дополняется введением *уравнений движения*. В разделе III будет показано, что существует столько конкретных формулировок теории, сколько есть различных конкретных матричных представлений векторов и операторов пространства $\mathcal{E}$; волновая механика является одним из таких частных представлений. Когда динамическое состояние квантовой системы известно не полностью, можно, следуя обычным методам статистической механики, представлять его статистическим ансамблем векторов гильбертова пространства. Эквивалентная процедура состоит во введении оператора особого типа — *матрицы плотности*; эти вопросы рассматриваются в последнем, четвертом разделе главы.

¹⁾ Пространство $\mathcal{E}$ играет в квантовой теории роль, аналогичную роли фазового пространства классической теории. Каждая точка фазового пространства представляет классическое динамическое состояние, каждый вектор пространства $\mathcal{E}$ представляет квантовое динамическое состояние. Во втором случае, однако, соответствие не является взаимоднозначным: два коллинеарных вектора пространства $\mathcal{E}$ представляют одно состояние; см. ниже, § 2.

Раздел I. ДИНАМИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ

§ 2. Определение вероятностей. Постулаты измерения

Каждому динамическому состоянию соответствует некоторое статистическое распределение значений каждой из динамических переменных, характеризующих систему. Вычисление распределений основано на постулате:

Среднее значение некоторой функции $F(A)$ от заданной физической величины A дается выражением

$$\langle F(A) \rangle = \langle u | F(A) | u \rangle, \quad (1)$$

где кет-вектор $|u\rangle$ представляет динамическое состояние, а наблюдаемая A — заданную физическую величину.

В частности, характеристическая функция $f(\xi)$ статистического распределения A есть среднее значение функции $e^{i\xi A}$:

$$f(\xi) = \langle u | e^{i\xi A} | u \rangle. \quad (2)$$

Поскольку статистическое распределение полностью определяется заданием характеристической функции, указанный постулат позволяет вычислить статистические распределения всех динамических переменных системы.

Выясним, как основной постулат влияет на соответствие между динамическими состояниями и кет-векторами. Каким бы ни был оператор $F(A)$, выражение (1) не меняется при умножении вектора $|u\rangle$ на произвольный фазовый множитель $e^{i\alpha}$ (α — некоторое вещественное число). Следовательно, статистические распределения, относящиеся к двум векторам, различающимся на фазовый множитель, строго одинаковы: два таких вектора представляют одно динамическое состояние. Другими словами, каждому динамическому состоянию соответствует вектор, определенный с точностью до фазового множителя. С другой стороны, поскольку $f(0) = 1$ (среднее значение 1 равно 1), необходимо, чтобы вектор $|u\rangle$ был нормирован на единицу

$$\langle u | u \rangle = 1. \quad (3)$$

Часто бывает удобно отказаться от последнего условия. С этой целью определение (1) для средних значений заменяют более общим выражением

$$\langle F(A) \rangle = \frac{\langle u | F(A) | u \rangle}{\langle u | u \rangle}. \quad (4)$$

При таком определении два пропорциональные друг другу вектора представляют одно и то же динамическое состояние (подразумевается, конечно, что векторы, о которых идет речь, имеют ограниченную норму).

Чтобы получить статистическое распределение A в явном виде, следует вычислить выражение (2) для характеристической функции $f(\xi)$ (или выражение (4), если $|u\rangle$ не нормирован на единицу) в представлении, где наблюдаемая A диагональна. Этот метод уже был изложен в гл. V, правда, с незначительными отличиями в терминологии. Здесь мы не будем вновь повторять сказанное там. Ограничимся формулировкой результатов²⁾:

1) Значения, которые может принимать величина A , принадлежат спектру собственных значений соответствующей наблюдаемой.

2) Пусть $\mathcal{E}_D$ есть подпространство, натянутое на собственные векторы A , принадлежащие собственным значениям, лежащим в некоторой области D спектра A ; обозначим с помощью $|u_D\rangle \equiv P_D|u\rangle$ проекцию кет-вектора $|u\rangle$ на $\mathcal{E}_D$. Вероятность w_D того, что результат измерения A принадлежит области D равна³⁾

$$w_D = \langle P_D \rangle = \frac{\langle u_D | u_D \rangle}{\langle u | u \rangle}. \quad (5)$$

Выражение (5) объединяет все результаты, полученные в частных случаях, рассмотренных в гл. V (задача 1). Действительно, D может быть одним собственным значением дискретного спектра и тогда (5) совпадает с формулой (V.21). Но D может быть также образована совокупностью нескольких различных дискретных собственных значений или быть частью непрерывного спектра, или же некоторой комбинацией двух предшествующих случаев. В частности, если D есть бесконечно малый интервал $(a(v), a(v+dv))$ непрерывного спектра, как в примере в конце § V.10, то $w_D = \omega(v) dv$, и плотность вероятности $\omega(v)$, вычисленная с помощью формулы (5), совпадает с той, которая получилась из (V.44).

Остается определить динамическое состояние системы по окончании измерения. Оно, конечно, будет зависеть от конкретных условий эксперимента, но может быть просто получено в случае *идеального измерения* (см. § V.13). Если в предположении идеального измерения наблюдение показывает, что система находится в собственном состоянии A , принадлежащем указанной выше области D , то динамическое состояние системы после измерения представляется проекцией вектора $|u\rangle$ на пространство $\mathcal{E}_D$. Иными словами, изменение (некаузальное)

²⁾ В некоторых книгах по квантовой теории два нижеследующих свойства называются соответственно *принципом квантования* и *принципом спектрального разложения*.

³⁾ w_D есть среднее значение проектора P_D , т. е. функции A , равной 1 для всех собственных векторов A , находящихся в $\mathcal{E}_D$, и равной нулю для всех собственных векторов A , ортогональных к $\mathcal{E}_D$.

вектора состояния в процессе измерения соответствует схеме:

$$|u\rangle \rightarrow \text{идеальное измерение, дающее результат } D \rightarrow P_D|u\rangle.$$

Этот постулат редукции волнового пакета может рассматриваться как определение идеального измерения.

Если условиться всегда представлять динамические состояния векторами, нормированными на единицу, то вектор состояния системы после измерения есть $P_D|u\rangle$, умноженный на фактор нормировки, определяемый с точностью до фазы, квадрат модуля которого равен $1/\omega_D$ или $1/\langle u|P_D|u\rangle$.

§ 3. Наблюдаемые квантовой системы и соотношения коммутации

На первом этапе исследования квантовой системы следует установить динамические переменные системы и построить алгебру соответствующих наблюдаемых. На деле различные наблюдаемые системы могут быть выражены как функции некоторого числа «основных наблюдаемых»; тогда искомые правила алгебры наблюдаемых можно получить с помощью правил коммутации этих основных наблюдаемых.

Когда квантовая система обладает классическим аналогом, что имело место во всех рассмотренных до сих пор случаях, можно установить самые общие правила, основанные на принципе соответствия.

В классической системе N измерений самой общей динамической переменной будет функция $2N$ -независимых переменных — N пространственных координат $q_1, q_2, \dots, q_N$ и N импульсов $p_1, p_2, \dots, p_N$. Те же самые динамические переменные приписываются квантовой системе. Вводятся N переменных положения и N переменных импульса. Этим переменным соответствуют наблюдаемые, которые мы обозначим теми же символами $q_1, \dots, q_N$ и $p_1, \dots, p_N$. Постулируем, что единственными некоммутирующими наблюдаемыми являются N пар, в которые входят пространственная координата и ее канонически сопряженный импульс; для этих пар имеем $[q_r, p_r] = i\hbar$. Таким образом,

$$[q_r, q_s] = 0, \quad [p_r, p_s] = 0, \quad (6)$$

$$[q_r, p_s] = i\hbar\delta_{rs} \quad (r, s = 1, 2, \dots, N), \quad (7)$$

Поскольку произвольные наблюдаемые являются функциями q и p , коммутаторы наблюдаемых находятся с помощью соотношений (6) и (7); их можно вычислить явно, пользуясь правилами алгебры коммутаторов (§ V.17). Это соответствие между наблюдаемыми квантовой системы и величинами классической системы — аналога уже неоднократно комментировано.

лось (§ II. 15 и § V. 3). Чтобы избежать неопределенности, следует всегда исходить из декартовых координат в конфигурационном пространстве и руководствоваться эмпирическими правилами § II. 15. В частности, правило «симметризации», данное в этом параграфе, гарантирует, что всякой вещественной величине, принадлежащей системе, сопоставляется эрмитов оператор.

Однако не все квантовые системы могут рассматриваться на основе принципа соответствия. Часто оказывается, что динамические переменные, вводимые на основе принципа соответствия с классической системой, не исчерпывают физических свойств исследуемой квантовой системы. В этом случае необходимо вводить дополнительные переменные. Выбор этих новых переменных и правил коммутации для них основывается на чисто интуитивных соображениях.

Среди физических величин, характеризующих систему, особо следует отметить энергию. Представляющая ее наблюдаемая H называется гамильтонианом системы. Если система имеет классический аналог, то H получается на основе принципа соответствия из функции Гамильтона классической механики.

§ 4. Соотношения неопределенности Гейзенберга

Соотношения неопределенности для координаты и импульса следуют непосредственно из соотношений коммутации (7).

Покажем в самом общем случае, что если две наблюдаемые A , B удовлетворяют уравнению

$$[A, B] = i\hbar, \quad (8)$$

то произведение их средних квадратичных отклонений всегда удовлетворяет неравенству

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2. \quad (9)$$

Доказательство по существу аналогично рассмотрению § IV. 8.

По определению

$$\Delta A = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2}, \quad \Delta B = (\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)^{1/2}.$$

Введем наблюдаемые

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle, \quad \hat{B} = B - \langle B \rangle;$$

тогда очевидно, что

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$$

и что

$$\Delta A = \Delta \hat{A} = \langle \hat{A}^2 \rangle^{1/2}, \quad \Delta B = \Delta \hat{B} = \langle \hat{B}^2 \rangle^{1/2}.$$

Допустим, что динамическое состояние системы представляется кет-вектором $|u\rangle$, нормированным на единицу, и применим неравенство Шварца к векторам $\hat{A}|u\rangle$ и $\hat{B}|u\rangle$:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \langle u | \hat{A}^2 | u \rangle \langle u | \hat{B}^2 | u \rangle \geq |\langle u | \hat{A}\hat{B} | u \rangle|^2.$$

Выделяя в $\hat{A}\hat{B}$ эрмитову и антиэрмитову части (ср. уравнение (VII. 29))

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + i \frac{\hbar}{2},$$

можно выделить в $\langle u | \hat{A}\hat{B} | u \rangle$ вещественную и мнимую части

$$\langle u | \hat{A}\hat{B} | u \rangle = \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle + i \frac{\hbar}{2}$$

и переписать неравенство Шварца в виде

$$(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4},$$

т. е.

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2,$$

что и требовалось доказать.

Чтобы произведение $\Delta A \cdot \Delta B$ стало равным своему наименьшему значению $\hbar/2$ необходимо с одной стороны, чтобы неравенство Шварца свелось к равенству, т. е. чтобы $\hat{A}|u\rangle = c\hat{B}|u\rangle$ (c — произвольная постоянная), а с другой стороны, чтобы среднее значение $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ было равно нулю, т. е.

$$\langle u | \hat{A}\hat{B} | u \rangle + \langle u | \hat{B}\hat{A} | u \rangle = (c^* + c) \langle u | \hat{B}^2 | u \rangle = 0,$$

откуда $\text{Re } c = 0$. Резюмируя, находим, что неравенство (9) сводится к равенству в том и только в том случае, когда $|u\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$(A - \alpha) |u\rangle = i\gamma (B - \beta) |u\rangle, \quad (10)$$

где α , β и γ суть произвольные вещественные постоянные.

Приложение этого результата к паре координата — импульс (q_r, p_r) предшествующего параграфа дает соотношение неопределенности

$$\Delta q_r \cdot \Delta p_r \geq \hbar/2 \quad (r = 1, 2, \dots, N), \quad (11)$$

причем равенство выполняется, если $|u\rangle$ есть решение уравнения

$$(p_r - i\gamma q_r)|u\rangle = (\alpha - i\gamma\beta)|u\rangle$$

(α , β и γ — произвольные вещественные постоянные).

§ 5. Определение состояний и построение пространства $\mathcal{E}$

После определения наблюдаемых нашей квантовой системы и установления коммутационных соотношений необходимо точно определить различные возможные квантовые состояния, т. е. необходимо построить гильбертово пространство, в котором действуют наблюдаемые. Для этого достаточно задать систему базисных векторов пространства и установить действие наблюдаемых на эти векторы. Следует, конечно, убедиться, что все операторы, представляющие физические величины, действительно являются наблюдаемыми, удовлетворяющими коммутационным соотношениям.

Чтобы определить базисную систему векторов, из всей совокупности наблюдаемых выделяют полный набор коммутирующих наблюдаемых $A, B, C, \dots$. Одновременное измерение соответствующих динамических переменных дает максимально возможную информацию о состоянии системы, т. е. полностью определяет некоторое динамическое состояние системы. Следовательно, каждый набор собственных значений $a, b, c, \dots$ этих наблюдаемых определяет вектор в пространстве $\mathcal{E}$ с точностью до постоянного множителя; произвольно фиксируя этот множитель, находим некоторый вектор $|abc\dots\rangle$. Множество векторов $|abc\dots\rangle$, получаемое при изменении каждого собственного значения $a, b, c, \dots$ на всем протяжении спектров $A, B, C, \dots$ образует полную ортогональную систему векторов в пространстве $\mathcal{E}$. Если же фиксировать подходящим образом нормировку векторов $|abc\dots\rangle$ — нормировку на единицу для векторов с конечной нормой, нормировку с помощью δ -функции Дирака для векторов, соответствующих непрерывному спектру, — то мы получим полную ортонормированную систему в $\mathcal{E}$. Таким образом, базисная система векторов в $\mathcal{E}$ определяется при задании спектров наблюдаемых $A, B, C, \dots$.

Действие базисных наблюдаемых $A, B, C, \dots$ на каждый из этих векторов оказывается автоматически определенным. Остается выяснить, как действуют на них другие наблюдаемые, способные представлять физические величины.

Рассмотрение одних только соотношений коммутации позволяет, вообще говоря:

а) убедиться в том, что набор $A, B, C, \dots$ составляет полный набор коммутирующих наблюдаемых;

- б) определить структуру спектров этих наблюдаемых;
- в) установить действие других наблюдаемых на векторы базисной системы.

Иначе говоря, знания алгебры наблюдаемых системы почти всегда достаточно для однозначного определения пространства $\mathcal{E}$, в котором они действуют⁴⁾.

Остается еще убедиться во внутренней согласованности полученной схемы, т. е. проверить, что операторы, представляющие физические величины, действительно являются наблюдаемыми.

Заметим, что на этом этапе теория уже допускает экспериментальную проверку. Физические величины определяются в принципе с помощью точных операций измерения, так что спектры их значений могут быть проверены на опыте. Необходимо, чтобы теоретический спектр, т. е. спектр собственных значений наблюдаемой, сопоставленной каждой физической величине, совпадал с результатами эксперимента.

§ 6. Квантовая одномерная система, обладающая классическим аналогом

Применим метод построения пространства $\mathcal{E}$ из § 5 к одномерной квантовой системе, обладающей классическим аналогом; наблюдаемые такой системы являются функциями двух из них, а именно q и p , связанными соотношением коммутации

$$[q, p] = i\hbar. \quad (12)$$

Величина q сама по себе образует полный набор коммутирующих наблюдаемых. Действительно, коммутатор q и заданной функции $A(q, p)$ согласно уравнению (V. 68) равен

$$[q, A] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p}, \quad (13)$$

следовательно, q коммутирует с A только, если A не зависит от p ; иными словами, единственными наблюдаемыми, коммутирующими с q , являются функции от q .

Простые соображения внутренней согласованности накладывают очень строгие условия на собственные функции и спектр собственных значений q . Пусть $|q_0\rangle$ есть собственный кет-вектор q

$$q|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle.$$

⁴⁾ Это справедливо только, если пространство $\mathcal{E}$ является неприводимым по отношению к указанным наблюдаемым; это условие, которое мы отмечаем здесь для полноты, всегда считается выполненным в дальнейших рассуждениях. Понятие неприводимости и его физический смысл будут подробно обсуждаться в гл. XV (§ 6).

Запишем условие того, что обе части равенства (12) имеют один и тот же диагональный элемент, соответствующий $|q_0\rangle$:

$$i\hbar \langle q_0 | q_0 \rangle = \langle q_0 | qp | q_0 \rangle - \langle q_0 | pq | q_0 \rangle;$$

$|q_0\rangle$ не может иметь конечной нормы, так как в противном случае правая часть равенства была бы равна нулю, а левая часть конечна и не равна нулю.

Рассмотрим далее оператор сдвига

$$S(\xi) = e^{-\frac{i}{\hbar} p \xi}. \quad (14)$$

Это функция наблюдаемой p , зависящая от параметра ξ . Ясно, что это унитарный оператор

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1,$$

так как эрмитово сопряженный оператор есть

$$S^\dagger(\xi) = S(-\xi) = e^{\frac{i}{\hbar} p \xi}.$$

Применяя уравнение (12), находим

$$[q, S] = i\hbar \frac{\partial S}{\partial p} = \xi S,$$

т. е.

$$qS = S(q + \xi) \quad (15)$$

и, следовательно,

$$qS|q_0\rangle = S(q + \xi)|q_0\rangle = (q_0 + \xi)S|q_0\rangle. \quad (16)$$

Таким образом, $S|q_0\rangle$ есть собственный вектор q , принадлежащий собственному значению $q_0 + \xi$. Этот вектор, очевидно, не равен нулю (в противном случае не существовало бы оператора, обратного S); его норма (бесконечная) та же, что и $|q_0\rangle$, ибо S — унитарный оператор

$$\langle q_0 | S^\dagger S | q_0 \rangle = \langle q_0 | q_0 \rangle.$$

Все это справедливо, каким бы ни было значение ξ во всем интервале $(-\infty, +\infty)$. Так, с помощью унитарного преобразования $|q_0\rangle$ с подходящим параметром можно образовать собственный кет-вектор q , соответствующий любому наперед заданному собственному значению в интервале $(-\infty, +\infty)$.

Мы приходим к заключению, что спектр q непрерывный, невырожденный и заполняет весь интервал $(-\infty, +\infty)$; собственные векторы имеют бесконечную норму.

Обозначим с помощью $|q'\rangle$ один из собственных кет-векторов q , принадлежащий собственному значению q'

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle;$$

$|q'\rangle$ определяется с точностью до постоянного множителя, абсолютную величину которого фиксируем условием нормировки

$$\langle q' | q'' \rangle = \delta(q' - q''). \quad (17)$$

Пространство $\mathcal{E}$, по определению, образовано линейными комбинациями векторов $|q'\rangle$.

Величина q очевидно является наблюдаемой этого пространства. Векторы $|q'\rangle$ суть базисные векторы некоторого представления векторов и операторов $\mathcal{E}$, а именно представления $\{q\}$, в котором оператор q диагонален

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

Покажем, что p есть вполне определенный эрмитов оператор в пространстве $\mathcal{E}$; для этого достаточно найти его матрицу в представлении $\{q\}$.

Рассмотрим вначале унитарный оператор $S(\xi)$, определенный уравнением (14). Поскольку этот оператор удовлетворяет уравнению (15), $S(\xi)|q'\rangle$ есть собственный вектор q , принадлежащий собственному значению $(q' + \xi)$:

$$S(\xi)|q'\rangle = c|q' + \xi\rangle,$$

где c — фазовый множитель⁵⁾, который может зависеть от ξ и q' . Выберем фазы базисных векторов так, чтобы

$$|q'\rangle = S(q')|0\rangle.$$

При этом фазовый множитель c будет равен 1, какими бы ни были ξ и q' . Действительно,

$$\begin{aligned} S(\xi)|q'\rangle &= S(\xi)S(q')|0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} p \xi} e^{-\frac{i}{\hbar} p q'} |0\rangle = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} p (\xi + q')} |0\rangle = S(q' + \xi)|0\rangle = |q' + \xi\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

или

$$\langle q' | S(\xi) | q'' \rangle = \langle q' | q'' + \xi \rangle = \delta(q' - q'' - \xi).$$

Зная таким образом матричные элементы $S(\xi)$ для любых значений параметра ξ и учитывая, что в пределе бесконечно малых значений этого параметра ($\xi \rightarrow \epsilon$)

$$S(\epsilon) \sim 1 - \frac{i}{\hbar} p \epsilon,$$

можем написать

$$\delta(q' - q'' - \epsilon) = \langle q' | S(\epsilon) | q'' \rangle \sim \delta(q' - q'') - \frac{i}{\hbar} \epsilon \langle q' | p | q'' \rangle,$$

⁵⁾ Ввиду того, что S — унитарный оператор, имеем

$$\langle q'' | S^\dagger(\xi) S(\xi) | q' \rangle = c^*(\xi, q'') c(\xi, q') \delta(q'' - q') = \delta(q'' - q'),$$

откуда $|c(\xi, q')| = 1$.

откуда

$$\langle q' | p | q'' \rangle = \frac{\hbar}{i} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\delta(q' - q'') - \delta(q' - q'' - \varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\hbar}{i} \delta'(q' - q''). \quad (20)$$

Поскольку «функция» δ' нечетна, ясно, что $\langle q'' | p | q' \rangle = = \langle q' | p | q'' \rangle^*$, т. е. оператор p эрмитов.

Проверим также, что q и p удовлетворяют условию коммутации (12):

$$\begin{aligned} \langle q' | (qp - pq) | q'' \rangle &= \langle q' - q'' \rangle \langle q' | p | q'' \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} (q' - q'') \delta'(q' - q'') = i\hbar \delta(q' - q'') \end{aligned}$$

(здесь использовано тождество (А.30) из дополнения А).

Остается показать, что p есть наблюдаемая. Для этого решим задачу о собственных значениях p в представлении $\{q\}$. Пусть $|p'\rangle$ — собственный кет-вектор, принадлежащий собственному значению p' . Уравнение

$$p | p' \rangle = p' | p' \rangle$$

в представлении $\{q\}$, с учетом уравнения (20), записывается в форме

$$\begin{aligned} p' \langle q' | p' \rangle &= \langle q' | p | p' \rangle = \int \langle q' | p | q'' \rangle dq'' \langle q'' | p' \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \delta'(q' - q'') \langle q'' | p' \rangle dq'' = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq'} (\langle q' | p' \rangle). \end{aligned}$$

Это дифференциальное уравнение для функции $\langle q' | p' \rangle$ от переменной q' ; общее его решение есть

$$\langle q' | p' \rangle = a e^{\frac{i}{\hbar} p' q'},$$

где a — произвольная постоянная. Оказывается, таким образом, что p имеет непрерывный спектр собственных значений p' , простирающийся от $-\infty$ до $+\infty$. Собственные векторы имеют бесконечную норму, они удовлетворяют условиям ортонормировки

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p''),$$

если принять $a = (2\pi\hbar)^{-1/2}$. Теперь ясно, что p наблюдаемая, ибо векторы $|p'\rangle$ удовлетворяют соотношению замкнутости. Действительно, оператор проектирования

$$P_p \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |p'\rangle dp' \langle p'|$$

в представлении $\{q\}$ имеет матричные элементы

$$\begin{aligned}\langle q' | P_p | q'' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q' | p' \rangle dp' \langle p' | q'' \rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} p' (q' - q'')} dp' = \delta(q' - q'').\end{aligned}$$

Следовательно,

$$P_p = 1.$$

С помощью основных наблюдаемых p и q можно построить любой оператор $F(p, q)$, представляющий различные динамические переменные системы. Всякий раз нетрудно проверить, что эти операторы эрмитовы. Для полноты следует показать, что они являются наблюдаемыми. Обычно в квантовой теории проходят мимо этих тонкостей и принимают без обсуждения, что все эрмитовы операторы, представляющие физические величины, являются наблюдаемыми.

§ 7. Построение пространства состояний путем тензорного умножения более простых пространств

Умея строить пространство $\mathcal{E}$ для одномерной системы, обладающей классическим аналогом, нетрудно решить ту же задачу для системы, также обладающей классическим аналогом, но уже с числом степеней свободы N .

В этом случае динамические переменные будут функциями $2N$ основных переменных положения и импульса. Представляющие их наблюдаемые подчиняются коммутационным соотношениям (6) и (7). Их можно подразделить на N пар (q_1, p_1) , (q_2, p_2) , ..., (q_N, p_N) , каждая из которых состоит из некоторой координаты и соответствующего канонически сопряженного импульса. Каждая пара наблюдаемых коммутирует со всеми наблюдаемыми из других пар.

Наблюдаемые данной пары, например (q_i, p_i) , могут рассматриваться как основные наблюдаемые одномерной системы того типа, который изучался в предшествующем параграфе. Мы уже умеем строить пространство состояний $\mathcal{E}_i$ такой системы: согласно результатам § 6, $\mathcal{E}_i$ образовано линейной суперпозицией ортонормированных кет-векторов $|q'_i\rangle$, причем индекс q'_i изменяется непрерывно во всем интервале $(-\infty, +\infty)$.

Пространство $\mathcal{E}$ динамических состояний системы с N степенями свободы получается как тензорное произведение (см. § VII.6) одномерных пространств $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_N$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_N,$$

иными словами, это пространство натянуто на кет-векторы

$$|q'_1 q'_2 \dots q'_N\rangle \equiv |q'_1\rangle |q'_2\rangle \dots |q'_N\rangle. \quad (21)$$

Каждой паре операторов q_i, p_i пространства $\mathcal{E}_i$ соответствует вполне определенная пара операторов q_i, p_i пространства — произведения $\mathcal{E}$. Таким образом, для представления $2N$ основных переменных мы получаем $2N$ вполне определенных операторов, действующих в $\mathcal{E}$. Согласно правилам тензорного умножения каждой наблюдаемой парциального пространства соответствует наблюдаемая полного пространства, две наблюдаемые из различных парциальных пространств коммутируют между собой, две наблюдаемые из одного парциального пространства $\mathcal{E}_i$ подчиняются в $\mathcal{E}$ тем же соотношениям коммутации, которым они подчиняются в $\mathcal{E}_i$. Следовательно, построенные нами в $\mathcal{E}$ операторы $q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N$ являются наблюдаемыми и подчиняются коммутационным соотношениям (6) и (7).

Множество векторов $|q'_1, \dots, q'_N\rangle$, получающееся при изменении каждого собственного значения $q'_1, \dots, q'_N$ в интервале $(-\infty, +\infty)$, образует базисную систему в $\mathcal{E}$ и определяет некоторое представление, а именно представление $\{q\}$. Полезно выписать в явном виде матричные элементы q и p в этом представлении. Для этого используем сокращенные обозначения:

$$|q'\rangle \equiv |q'_1 q'_2 \dots q'_N\rangle, \quad (22)$$

$$\delta(q' - q'') \equiv \prod_{i=1}^N \delta(q'_i - q''_i) \equiv \delta(q'_1 - q''_1) \delta(q'_2 - q''_2) \dots \delta(q'_N - q''_N), \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial q'_n} [\delta(q' - q'')] \equiv \delta'(q'_n - q''_n) \prod_{i \neq n} \delta(q'_i - q''_i). \quad (24)$$

Символ $\prod_{i \neq n}$ обозначает произведение $N - 1$ сомножителей, исключая множитель с индексом n .

Применяя соотношения (17), (18) и (20) из § 6, получим последовательно: условия ортонормированности

$$\langle q' | q'' \rangle = \prod_{i=1}^N \langle q'_i | q''_i \rangle = \delta(q' - q''); \quad (25)$$

матричные элементы (диагональные) координат

$$\langle q' | q_n | q'' \rangle = \langle q'_n | q_n | q''_n \rangle \prod_{i \neq n} \langle q'_i | q''_i \rangle = q'_n \delta(q' - q'') \quad (26)$$

и матричные элементы (недиагональные) импульсов

$$\begin{aligned} \langle q' | p_n | q'' \rangle &= \langle q'_n | p_n | q''_n \rangle \prod_{i \neq n} \langle q'_i | q''_i \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} \delta'(q'_n - q''_n) \prod_{i \neq n} \delta(q'_i - q''_i) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_n} \delta(q' - q''). \end{aligned} \quad (27)$$

Выполнение коммутационных соотношений (6) и (7) нетрудно проверить, пользуясь приведенными здесь явными выражениями элементов матриц, представляющих q и p .

Любая динамическая переменная системы является функцией q и p , поэтому ей соответствует некоторый оператор, вполне определенный в пространстве $\mathcal{E}$. Следует, конечно, убедиться в том, что этот оператор является наблюдаемой. Однако согласно сделанному выше замечанию этот пункт в квантовой теории обычно принимают без обсуждения.

Метод построения пространства состояний системы путем тензорного умножения более простых пространств имеет самое широкое применение. На практике динамические переменные системы всегда можно представить в виде функций от некоторого числа «основных» переменных, а эти переменные часто можно классифицировать по отдельным подмножествам, так что переменная, принадлежащая одному подмножеству, совместна со всеми переменными других подмножеств. Предположим, например, что нам удалось разделить «основные» переменные на два подмножества $(A_1, B_1, \dots)$ и $(A_2, B_2, \dots)$ и что каждая переменная (1) совместна с каждой переменной (2). Каждое подмножество само по себе определяет парциальную систему, пространство состояний которой мы умеем строить. Пусть $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$ суть пространства состояний, относящиеся к парциальным системам (1) и (2). Тогда очевидно, что пространство состояний $\mathcal{E}$ полной системы есть тензорное произведение двух парциальных пространств

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2.$$

Раздел II. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

§ 8. Оператор эволюции и уравнение Шредингера

Мы хорошо знаем, что на микроскопическом уровне нельзя четко отделить физическую систему от измерительного аппарата, поэтому эволюция квантовой системы, подвергнутой некоторому измерению, перестает быть каузальной. Напротив, эволюция системы, изолированной от всяких внешних воздействий, может быть точно предсказана. Пусть $|\psi(t_0)\rangle$ — кет-век-

тор, представляющий динамическое состояние системы в момент времени t_0 , тогда кет-вектор $|\psi(t)\rangle$, представляющий состояние в некоторый последующий момент t , вполне определяется заданием $|\psi(t_0)\rangle$, если, что мы и будем предполагать в дальнейшем, система не подвергается измерению в промежуток времени (t_0, t) . В данном параграфе мы изучим этот фундаментальный закон эволюции системы.

В первую очередь постулируем, что *линейная суперпозиция* состояний сохраняется во времени. Отсюда следует, что соответствие между $|\psi(t_0)\rangle$ и $|\psi(t)\rangle$ является линейным и определяет некоторый линейный оператор $U(t, t_0)$, который называется *оператором эволюции*

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (28)$$

Если система *консервативна*, т. е. ее энергия, представляемая гамильтонианом H , явно не зависит от времени, то оператор $U(t, t_0)$ можно найти, если потребовать, чтобы движение системы с энергией E было периодическим и чтобы соответствующая (круговая) частота ω выражалась законом Эйнштейна

$$E = \hbar\omega. \quad (29)$$

Действительно, поскольку пространство $\mathcal{E}$ натянуто на собственные векторы H , для определения оператора U достаточно знать его действие на каждый из этих векторов. Пусть $|u_E(t_0)\rangle$ есть собственный вектор H , соответствующий энергии E

$$H |u_E(t_0)\rangle = E |u_E(t_0)\rangle. \quad (30)$$

В согласии с законом Эйнштейна постулируем, что эволюция вектора во времени определяется формулой

$$|u_E(t)\rangle = e^{-i\omega(t-t_0)} |u_E(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |u_E(t_0)\rangle$$

или, учитывая уравнение (30),

$$|u_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |u_E(t_0)\rangle.$$

Следовательно,

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}. \quad (31)$$

Дифференцируя⁶⁾ обе части этого уравнения по t , получаем

⁶⁾ Производная оператора $X(t)$, зависящего от непрерывно изменяющегося параметра t , определяется подобно производной обычной функции: $\frac{dX}{dt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{X(t+\varepsilon) - X(t)}{\varepsilon}$ (см. задачу 3).

дифференциальное уравнение

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = HU(t, t_0), \quad (32)$$

при этом $U(t, t_0)$ есть решение этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию

$$U(t_0, t_0) = 1. \quad (33)$$

Обобщая этот результат, принимаем, что оператор $U(t, t_0)$ удовлетворяет уравнению (32) и начальному условию (33) даже, когда квантовая система не является консервативной. В последнем случае оператор H явно зависит от времени, поэтому, разумеется, соотношение (29) теряет всякий смысл и оператор U более не выражается формулой (31).

Отметим, что U может быть определен также интегральным уравнением

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t HU(t', t_0) dt'. \quad (34)$$

Уравнения (32)–(33) или интегральное уравнение (34) выражают фундаментальный закон эволюции квантовой системы. Эквивалентным выражением этого закона является *уравнение Шредингера* или дифференциальное уравнение эволюции динамических состояний системы. Это уравнение можно получить, дифференцируя почленно уравнение (28)

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt} U(t, t_0) \right) |\psi(t_0)\rangle$$

и подставляя вместо $\frac{d}{dt} U(t, t_0)$ выражение (32). Находим

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (35)$$

Чтобы норма вектора $|\psi(t)\rangle$ оставалась постоянной во времени необходимо и достаточно, чтобы оператор H был эрмитовым; это легко показать, исходя из уравнения Шредингера. Эрмитовость гамильтониана, естественно, всегда предполагается.

Заметим, что поскольку H эрмитов, оператор $U(t, t_0)$ *унитарен*. Когда H не зависит от времени, это непосредственно следует из выражения (31). Но даже если H явно зависит от времени, имеем согласно уравнению Шредингера

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt \right) |\psi(t)\rangle.$$

Поскольку H — эрмитов оператор, оператор

$$U(t + dt, t) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} H dt$$

является инфинитезимальным унитарным оператором (см. § VII.22): переход от кет-вектора в момент времени t к кет-вектору в момент времени $t + dt$ осуществляется с помощью инфинитезимального унитарного преобразования. Преобразование $U(t, t_0)$, переводящее $|\psi(t_0)\rangle$ в $|\psi(t)\rangle$, есть, следовательно, последовательность инфинитезимальных унитарных преобразований; тогда $U(t, t_0)$, как произведение инфинитезимальных унитарных операторов, является унитарным оператором.

§ 9. «Представление» Шредингера

Вывод уравнения Шредингера завершает изложение общей схемы описания квантовых явлений, которую мы привели в этой главе. Резюмируем эту схему следующим образом.

1°. *Определение динамических состояний*

Динамическое состояние квантовой системы определяется заданием точных значений динамических переменных, входящих в полный набор совместных переменных. Осуществляя одновременное измерение переменных полного набора, мы однозначно определяем состояние системы в момент t , когда производится измерение.

2°. *Определение пространства состояний*

Каждое состояние может быть представлено (принцип суперпозиции) кет-вектором $|\chi\rangle$ (нормированным на единицу и определяемым с точностью до фазового множителя) некоторого векторного пространства $\mathcal{S}$. Каждая динамическая переменная представляется наблюдаемой из этого пространства; состояниями, в которых динамическая переменная имеет определенные значения, являются состояния, представляемые собственными векторами этой наблюдаемой, причем значения динамической переменной равны собственным значениям наблюдаемой, соответствующим указанным собственным векторам. Наблюдаемые удовлетворяют однородным алгебраическим соотношениям, которые можно установить, исходя из соотношений коммутации. Совместные переменные представляются коммутирующими наблюдаемыми.

3°. *Определение вероятностей*

Если произвести одновременное измерение полного набора совместных динамических переменных квантовой системы, то вероятность найти систему в состоянии $|\chi\rangle$, т. е. найти те значения динамических переменных, которые соответствуют состоянию $|\chi\rangle$, равна квадрату абсолютного значения скалярного произведения вектора $|\psi\rangle$ (нормированного на единицу), представляющего динамическое состояние системы в момент измерения, на вектор $|\chi\rangle$, т. е. $|\langle\chi|\psi\rangle|^2$. В более общем случае вероятность

найти систему в подпространстве $\mathcal{E}_D$ (т. е. найти систему в одном из состояний этого подпространства) равна среднему значению оператора проектирования на это подпространство P_D , именно

$$\langle P_D \rangle = \langle \psi | P_D | \psi \rangle.$$

4°. Уравнение эволюции

В отсутствие всяких внешних воздействий динамическое состояние системы эволюционирует во времени строго причинным образом. Вектор $|\psi(t)\rangle$, представляющий это состояние в пространстве $\mathcal{E}$, непрерывно изменяется, подчиняясь уравнению Шредингера (35). Другими словами, переход от состояния $|\psi(t_0)\rangle$ к состоянию $|\psi(t)\rangle$ осуществляется с помощью унитарного преобразования (28), где $U(t, t_0)$ есть унитарный оператор, определяемый уравнениями (32) и (33).

Зная динамическое состояние $|\psi\rangle$ системы в начальный момент времени t_0 , мы можем предсказать статистическое распределение результатов любых измерений системы в любой момент времени t_1 , следующий за t_0 . Действительно, динамическое состояние системы в момент начала измерения есть

$$|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

и, следовательно, вероятность найти систему в наперед заданном состоянии $|\chi\rangle$ равна

$$|\langle \chi | \psi(t_1) \rangle|^2 = |\langle \chi | U(t_1, t_0) | \psi \rangle|^2. \quad (36)$$

В принятой выше схеме описания явлений состояние физической системы представляется изменяющимся во времени кет-вектором $|\psi(t)\rangle$. Напротив, физические величины, по крайней мере те из них, которые не зависят явно от времени, представляются фиксированными наблюдаемыми пространства $\mathcal{E}$. Аналогично, собственные векторы наблюдаемых являются фиксированными векторами пространства $\mathcal{E}$; именно таковы векторы $|\chi\rangle$, $|\psi\rangle$ в выражении (36). Этот способ описания квантовых явлений обычно называется «представлением»⁷⁾ Шредингера.

⁷⁾ Не следует смешивать это «представление» с понятием представления векторов и операторов векторного пространства матрицами. «Представление», о котором идет речь, есть представление движения квантовой системы. Чтобы исключить недоразумения, следовало бы говорить о «способе описания» Шредингера. К сожалению, исторически утвердился термин «представление». Мы будем ставить его в кавычки всякий раз, когда он будет употребляться в данном смысле. Различие, которое мы должны делать здесь, аналогично различию между унитарными преобразованиями матриц и унитарными преобразованиями векторов и операторов (см. гл. VII, раздел III).

§ 10. «Представление» Гейзенберга

Если произвести унитарное преобразование кет-векторов и наблюдаемых «представления» Шредингера и приписать преобразованным величинам тот же физический смысл, что и ранее, то мы получим некоторый новый способ описания явлений, строго эквивалентный первоначальному. При таком преобразовании наблюдаемые преобразуются в наблюдаемые, обладающие тем же спектром собственных значений, собственные векторы переходят в собственные векторы, алгебраические соотношения, соотношения сопряжения и скалярные произведения сохраняются. Поскольку измеряемыми величинами являются только модули скалярных произведений (см. уравнение (30)), очевидно, что все предсказания на основе новых величин тождественны предсказаниям, сделанным на основе старых.

В частном случае можно определить «представление» Гейзенберга, производя унитарное преобразование, зависящее от времени и осуществляемое оператором $U^+(t, t_0)$. Будем обозначать старые величины индексом S , а новые — индексом H . Кет-вектор

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle,$$

представляющий динамическое состояние системы в момент времени t , преобразуется в «неподвижный» кет-вектор

$$|\psi_H\rangle = U^+(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle. \quad (37)$$

Напротив, наблюдаемая A_S «представления» Шредингера преобразуется в

$$A_H(t) = U^+(t, t_0) A_S U(t, t_0). \quad (38)$$

Мы видим, что даже если A_S не зависела явно от времени, наблюдаемая A_H непрерывно изменяется. Если использовать дифференциальное уравнение (32) и эрмитово сопряженное уравнение, можно путем почленного дифференцирования (38) получить

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dA_H}{dt} &= -U^+ H A_S U + i\hbar U^+ \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^+ A_S H U = \\ &= U^+ [A_S, H] U + i\hbar U^+ \frac{\partial A_S}{\partial t} U. \end{aligned} \quad (39)$$

В этом уравнении H есть гамильтониан в «представлении» Шредингера. Вводя гамильтониан «представления» Гейзенберга

$$H_H = U^+ H U,$$

находим

$$U^+ [A_S, H] U = [A_H, H_H].$$

Наблюдаемая A_S — некоторая функция основных наблюдаемых «представления» Шредингера — может и явно зависеть от времени; второй член в правой части (39) учитывает это обстоятельство. Наблюдаемая $\partial A_S / \partial t$ есть также некоторая функция наблюдаемых «представления» Шредингера. Если обозначить с помощью $\partial A_H / \partial t$ функцию, получаемую из предшествующей путем замены всех наблюдаемых на соответствующие наблюдаемые «представления» Гейзенберга, то получим

$$\frac{\partial A_H}{\partial t} = U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U.$$

Поэтому уравнение (39) записывается в форме

$$i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t} = [A_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t}. \quad (40)$$

Это уравнение известно как *уравнение Гейзенберга*.

В заключение можно сделать вывод, что «представление» Гейзенберга получается путем придания пространству векторов «представления» Шредингера некоторого общего движения, выбираемого таким образом, чтобы динамическое состояние квантовой системы было представлено неподвижным кет-вектором $|\psi_H\rangle$. Другими словами, *всякий неподвижный кет-вектор «представления» Гейзенберга описывает возможное движение квантовой системы. В противоположность этому различные физические величины представляются наблюдаемыми, изменяющимися во времени согласно закону (38) или, что то же самое, согласно уравнению Гейзенберга (40) с начальным условием $A_H(t_0) = A_S(t_0)$.*

Уравнения (38) и (40) применимы, разумеется, к любой функции наблюдаемых «представления» Гейзенберга и, в частности, к выражению $e^{i\xi A_H}$ или оператору проектирования $P_D^{(H)}$ на подпространство собственных векторов, принадлежащих собственным значениям в некоторой области D спектра A_H .

Точно так же, кет-вектор $|\chi_H\rangle$, представляющий точное задание набора совместных переменных, вообще говоря, зависит от времени и получается из своего аналога $|\chi_S\rangle$ «представления» Шредингера с помощью формулы

$$|\chi_H(t)\rangle = U^\dagger(t, t_0) |\chi_S\rangle. \quad (41)$$

Предположим, что движение квантовой системы представляется, начиная с момента времени t_0 , неподвижным кет-вектором $|\psi_H\rangle$. Тогда вероятность найти ее в состоянии $|\chi_H\rangle$ в результате измерения, производимого в последующий момент времени t_1 , есть

$$|\langle \chi_H(t_1) | \psi_H \rangle|^2.$$

Эта величина равна той, которая получается с помощью соответствующих кет-векторов «представления» Шредингера (уравнение (36)), ибо скалярное произведение инвариантно относительно унитарного преобразования $U^{\dagger}(t_1, t_0)$.

§ 11. «Представление» Гейзенберга и принцип соответствия

Как мы видели, «представления» Шредингера и Гейзенберга строго эквивалентны. На практике чаще используется «представление» Шредингера, так как оно более удобно для вычислений. Решение уравнения Шредингера, т. е. уравнения для векторов, *a priori* должно быть проще решения уравнения Гейзенберга, которое является операторным уравнением. Однако некоторые свойства квантовых систем наиболее отчетливо проявляются в «представлении» Гейзенберга.

Особенно ярко проявляется в «представлении» Гейзенберга формальная аналогия между классической и квантовой теориями. Подобно движению классической системы движение квантовой системы в «представлении» Гейзенберга описывается зависимостью от времени характеризующих систему динамических переменных.

Рассмотрим поэтому квантовую систему, обладающую классическим аналогом, и сравним описание движения двух систем. Каждой физической величине классической системы соответствует физическая величина квантовой системы. Единственное различие состоит в том, что физические величины классической системы подчиняются правилам обычной алгебры, в то время как их квантовые аналоги представляют собой операторы и подчиняются законам некоммутативной алгебры. Но в тех случаях, когда можно отождествить выражения некоммутативной алгебры с выражениями обычной алгебры, уравнения движения квантовых величин совпадают с уравнениями для их классических аналогов. Действительно, уравнения Гейзенберга для переменных $q_1, \dots, q_N$ и $p_1, \dots, p_N$ могут быть записаны в форме

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [q_i, H] = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, H] = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (I)$$

($i = 1, 2, \dots, N$).

При выводе этих уравнений учитывались основные коммутационные соотношения между q и p и свойства (V.67) и (V.68), которые из них следуют. Система уравнений (I) формально идентична канонической системе уравнений Гамильтона классической механики.

Всякая классическая динамическая переменная $A_{кл} = A(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N; t)$ подчиняется уравнению движения

$$\frac{dA_{кл}}{dt} = \{A_{кл}, H_{кл}\} + \frac{\partial A_{кл}}{\partial t}, \quad (42)$$

где $\{A_{кл}, H_{кл}\}$ обозначает так называемые скобки Пуассона

$$\{A, H\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right).$$

Мы видим, что классическое уравнение (42) совпадает с уравнением Гейзенберга, если можно отождествить скобки Пуассона $\{A, H\}$ с коммутатором $[A_H, H_H]/i\hbar$. Пользуясь основными коммутационными соотношениями и сходством правил алгебры коммутаторов и алгебры скобок Пуассона, можно действительно показать идентичность этих двух выражений, выбирая соответствующим образом порядок q и p в явном выражении скобок Пуассона.

§ 12. Интегралы движения

Понятие постоянной или интеграла движения наиболее ясно и прозрачно именно в «представлении» Гейзенберга. Динамическая переменная, *не зависящая явно от времени*, является постоянной движения, если соответствующая наблюдаемая C_H в «представлении» Гейзенберга остается постоянной во времени. Вследствие этого ее система собственных векторов остается неподвижной, так что статистическое распределение результатов наблюдения этой величины при всех условиях не зависит от времени осуществления измерения.

Следуя этому определению постоянной движения, можем написать

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_H = [C_H, H_H] = 0.$$

Таким образом, постоянные движения представляются *наблюдаемыми, которые коммутируют с гамильтонианом*. Этот результат, впрочем, равным образом справедлив и в «представлении» Шредингера, так как соотношения коммутации сохраняются при унитарном преобразовании.

Будучи независимой от времени, наблюдаемая C_H остается равной своему начальному значению:

$$C_H(t) = C_H(t_0) = C_S = C.$$

Если, в частности, динамическое состояние системы представляется в «представлении» Гейзенберга собственным вектором C

$$C_H |\psi_H\rangle = c |\psi_H\rangle,$$

то переменная C сохраняет определенное значение c в течение всего времени; говорят, что собственное значение c является *хорошим квантовым числом*. Нетрудно, впрочем, показать, что C

коммутирует с оператором эволюции $U(t, t_0)$; вследствие этого кет-вектор $|\psi_S(t)\rangle$ «представления» Шредингера остается постоянно в подпространстве собственного значения c

$$C|\psi_S(t)\rangle = c|\psi_S(t)\rangle.$$

§ 13. Уравнение эволюции средних значений и соотношение неопределенности время-энергия

Исходя из «представления» Гейзенберга, особенно просто написать дифференциальное уравнение для среднего значения заданной наблюдаемой A_H . Действительно, поскольку $|\psi_H\rangle$ не зависит от времени, имеем

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \psi_H | A_H | \psi_H \rangle = \langle \psi_H | \frac{dA_H}{dt} | \psi_H \rangle.$$

Пользуясь уравнением Гейзенберга, вновь получаем уравнение (V.72)

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (43)$$

Если же воспользоваться системой (I), то получаются уравнения Эрнфеста (§ VI.2).

В качестве приложения уравнения (43) дадим точный вывод соотношения неопределенности время-энергия (см. § IV.10). Рассмотрим систему, гамилтониан которой не зависит явно от времени, и пусть A есть некоторая другая наблюдаемая этой системы, также не зависящая от времени. Мы анализируем динамическое состояние системы в заданный момент времени t . Пусть $|\psi\rangle$ есть вектор, представляющий это состояние. Обозначим с помощью ΔA , ΔE средние квадратичные отклонения A и H соответственно. Применим неравенство Шварца к векторам $(A - \langle A \rangle)|\psi\rangle$ и $(H - \langle H \rangle)|\psi\rangle$ и повторим слово в слово рассуждения § 4. Мы найдем после вычислений, что

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle|, \quad (44)$$

причем равенство реализуется, если $|\psi\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$(A - \alpha)|\psi\rangle = i\gamma(H - \varepsilon)|\psi\rangle,$$

где α , γ и ε — некоторые вещественные постоянные (ср. уравнение (10)). Однако согласно уравнению (43)

$$\langle [A, H] \rangle = i\hbar \frac{d\langle A \rangle}{dt};$$

неравенство (44) можно поэтому записать в форме

$$\frac{\Delta A}{|d\langle A\rangle/dt|} \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

или

$$\tau_A \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (45)$$

если положить

$$\tau_A = \left| \frac{\Delta A}{d\langle A\rangle/dt} \right|, \quad (46)$$

где τ_A — характеристическое время эволюции статистического распределения A . Это время, необходимое для того, чтобы центр $\langle A \rangle$ распределения сместился на ширину распределения ΔA , т. е. время, необходимое для заметного изменения распределения. Таким образом, для каждой динамической переменной можно ввести характеристическое время эволюции.

Пусть теперь τ есть наименьшее из так определенных характеристических времен; τ можно рассматривать как характеристическое время эволюции самой физической системы: каким бы ни было измерение, осуществляемое в системе в момент времени t' , его статистическое распределение будет практически одинаковым с распределением измерения в момент t , если разность $|t - t'|$ меньше τ .

Согласно неравенству (45), τ и ΔE удовлетворяют соотношению неопределенности время-энергия

$$\tau \cdot \Delta E \geq \hbar/2. \quad (47)$$

Если, в частности, система находится в стационарном состоянии, то $d\langle A\rangle/dt = 0$ каким бы ни было A и, следовательно, τ бесконечно велико; при этом $\Delta E = 0$ в согласии с соотношением (47).

§ 14. Промежуточные «представления»

«Представления» Шредингера и Гейзенберга не являются единственно возможными. Всякое унитарное преобразование векторов и наблюдаемых «представления» Шредингера (или Гейзенберга) приводит к новому «представлению». Все эти «представления» дают строго эквивалентные описания квантовых явлений. Для каждой конкретной проблемы выбирают то «представление», которое наилучшим образом подходит для ее разрешения.

Всякая проблема квантовой механики в конечном счете сводится к более или менее полному и более или менее точному определению свойств унитарного оператора $U(t, t_0)$; действительно, все предсказания теории заключены в элементах

матрицы $U(t, t_0)$, таких как в уравнении (36). Решение уравнения (32) является поэтому центральной проблемой теории. Если известно некоторое приближенное решение этого уравнения $U^{(0)}(t, t_0)$, то часто бывает удобно положить

$$U = U^{(0)}U'. \quad (48)$$

Подставляя это выражение в уравнение (32) и умножая обе стороны уравнения на унитарный оператор $U^{(0)\dagger}$ слева, получаем дифференциальное уравнение

$$i\hbar \frac{d}{dt} U' = U^{(0)\dagger} \left(H U^{(0)} - i\hbar \frac{dU^{(0)}}{dt} \right) U'. \quad (49)$$

Решение U' этого уравнения удовлетворяет начальному условию

$$U'(t_0, t_0) = 1.$$

Если приближение удачно, оператор U' медленно меняется во времени; это хорошо видно из уравнения (49), так как при удачном выборе $U^{(0)}$ оператор $H U^{(0)} - i\hbar \frac{dU^{(0)}}{dt}$ мал. Поэтому уравнение (49) легко (лучше, чем (32)) допускает приближенное решение⁸⁾.

Поскольку оператор $U^{(0)}$ унитарен, оператор

$$H^{(0)}(t) \equiv i\hbar \left[\frac{d}{dt} U^{(0)}(t, t_0) \right] U^{(0)\dagger}(t, t_0)$$

эрмитов (задача 6). Таким образом, оператор $U^{(0)}(t, t_0)$ является строгим решением уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)} = H^{(0)} U^{(0)}, \quad U^{(0)}(t_0, t_0) = 1. \quad (50)$$

Гамильтониан H можно представить в виде суммы двух операторов

$$H = H^{(0)} + H',$$

один из которых $-H'$ — в наших предположениях можно рассматривать как малое возмущение, а второй $-H^{(0)}$ есть гамильтониан уравнения Шредингера, которое мы умеем интегрировать. В этих обозначениях уравнение (49) записывается просто

$$i\hbar \frac{d}{dt} U' = H'_I U', \quad (51)$$

причем H'_I получается из H' с помощью унитарного преобразования, зависящего от времени

$$H'_I = U^{(0)\dagger} H' U^{(0)}. \quad (52)$$

⁸⁾ Обсуждаемые манипуляции являются обобщением на случай дифференциальных операторных уравнений известного метода вариации произвольной постоянной в элементарной теории дифференциальных уравнений.

Мы видим, что удобно ввести «представление», промежуточное между «представлениями» Шредингера и Гейзенберга, а именно то, которое получается при действии на векторы и наблюдаемые «представления» Шредингера унитарного оператора $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$. Обозначим с помощью индекса I векторы и наблюдаемые этого нового «представления»:

$$|\psi_I(t)\rangle = U^{(0)\dagger} |\psi_S(t)\rangle, \quad (53)$$

$$A_I(t) = U^{(0)\dagger} A_S U^{(0)}. \quad (54)$$

В промежуточном «представлении» вектор $|\psi_I(t)\rangle$, представляющий возможное движение квантовой системы, равен $U' |\psi_S(t_0)\rangle$. Согласно уравнению (51), этот вектор эволюционирует (медленно) во времени, подчиняясь уравнению Шредингера с гамильтонианом, выражающим энергию возмущения H'_I

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H'_I |\psi_I(t)\rangle. \quad (55)$$

С другой стороны, физические величины представляются подвижными наблюдаемыми; эти наблюдаемые подчиняются уравнениям движения Гейзенберга с «невозмущенным» гамильтонианом H^0 :

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_I = [A_I, H_I^{(0)}] + i\hbar \frac{\partial A_I}{\partial t}, \quad (56)$$

что легко показать, производя с уравнением (54) те же манипуляции, которые в случае уравнения (38) привели к выводу уравнения Гейзенберга.

Раздел III. РАЗЛИЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТЕОРИИ

§ 15. Определение представления

Согласно теории, развитой в двух первых разделах, все необходимые для описания квантовой системы элементы оказываются в наличии, если определены ее основные динамические переменные, коммутационные соотношения, которым подчиняются представляющие их наблюдаемые, и явное выражение через эти основные наблюдаемые гамильтониана, который определяет эволюция системы во времени. Тогда можно построить пространство $\mathcal{E}$ векторов, представляющих различные возможные динамические состояния системы, определить физический смысл векторов пространства, решая задачи на собственные значения для различных наблюдаемых, выписать и решить фундаментальные уравнения эволюции и, наконец,

осуществить вычисление статистических распределений результатов измерений, которые теория должна предсказать.

Чтобы решить все эти проблемы анализа и алгебры в пространстве $\mathcal{E}$, всегда можно выбрать (и бесконечным числом способов) полную ортонормированную систему векторов и представить операторы и векторы в $\mathcal{E}$ с помощью матриц в представлении, где базисом служит выбранная полная система векторов.

Таким образом, всякая динамическая переменная системы представляется квадратной эрмитовой матрицей, всякое динамическое состояние — правым вектором (или эрмитово сопряженным левым вектором), определенным с точностью до постоянного множителя.

Существует столько возможных представлений теории, сколько имеется различных базисных систем векторов. Переход от одного представления к другому осуществляется с помощью унитарного преобразования. Эти унитарные преобразования матриц не следует смешивать с унитарными преобразованиями операторов и векторов, которые позволяют, согласно разделу II, изменить «представление» движения самой квантовой системы.

Чаще всего представление определяется заданием полного набора коммутирующих наблюдаемых: общие собственные векторы этих наблюдаемых как раз и являются базисными векторами представления. Базисные наблюдаемые представления и все функции этих наблюдаемых в этом представлении выражаются диагональными матрицами.

§ 16. Волновая механика

Волновая механика является частной формулировкой квантовой теории, когда принимается «представление» Шредингера и выбирается представление, в котором диагональными являются операторы координат.

Вернемся к квантовой системе, обладающей классическим аналогом, с N степенями свободы, которая рассматривалась в § 7. Координаты $q_1, q_2, \dots, q_N$ образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых и определяют представление $\{q\}$. Это представление уже использовалось выше при построении самого пространства $\mathcal{E}$. При подходящем выборе фаз и нормировки базисных векторов мы получили очень простые выражения для матричных элементов операторов q и p (уравнения (26—27)).

Основными уравнениями представления $\{q\}$ являются соотношения ортонормированности (25) и соотношение замкнутости, которое в сокращенных обозначениях § 7 записывается в форме

$$P_q \equiv \int |q'\rangle dq' \langle q'| = 1 \quad (dq = dq_1 dq_2 \dots dq_N). \quad (57)$$

Каждый кет-вектор $|\psi\rangle$ представляется матрицей с одним столбцом и компонентами $\langle q'|\psi\rangle$. Эта функция координат $q'_1, q'_2, \dots, q'_N$ в конфигурационном пространстве, которую можно записать в виде $\psi(q'_1, q'_2, \dots, q'_N)$, и есть волновая функция, представляющая динамическое состояние системы на языке волновой механики:

$$\langle q'|\psi\rangle \equiv \langle q'_1 q'_2 \dots q'_N|\psi\rangle \equiv \psi(q'_1, q'_2, \dots, q'_N). \quad (58)$$

Скалярное произведение $|\psi\rangle$ на $|\varphi\rangle$ равно скалярному произведению соответствующих волновых функций в том виде, как оно определялось в волновой механике:

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \langle \varphi|P_q|\psi\rangle = \int \langle \varphi|q'\rangle dq' \langle q'|\psi\rangle = \int \varphi^*(q') \psi(q') dq'. \quad (59)$$

Проверим тождественность операторов волновой механики и матриц, представляющих наблюдаемые в $\{q\}$ -представлении.

Пользуясь выражением (26) для матрицы наблюдаемой q_n , убеждаемся, что $q_n|\psi\rangle$ представляется волновой функцией

$$\langle q'|q_n|\psi\rangle = q'_n \langle q'|\psi\rangle = q'_n \psi(q')$$

и вообще действие некоторой функции $V(q) \equiv V(q_1, q_2, \dots, q_N)$ от координат пространства конфигураций на кет-вектор $|\psi\rangle$ сводится к умножению $\psi(q')$ на $V(q')$

$$\langle q'|V(q)|\psi\rangle = V(q') \psi(q'). \quad (60)$$

Далее, пользуясь явным выражением (27) для матрицы, представляющей наблюдаемую p_n , убеждаемся, что состояние $p_n|\psi\rangle$ представляется волновой функцией:

$$\begin{aligned} \langle q'|p_n|\psi\rangle &= \int \langle q'|p_n|q''\rangle dq'' \langle q''|\psi\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \frac{\partial}{\partial q'_n} [\delta(q' - q'')] \psi(q'') dq'' = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_n} \psi(q'). \end{aligned} \quad (61)$$

Следовательно, наблюдаемая p_n представляется операцией частного дифференцирования $-i\hbar \partial/\partial q_n$ волновой функции, стоящей справа от оператора p_n .

Таким образом, интересующая нас тождественность без труда проверяется для функций координат (уравнение (60)) и для составляющих импульса (уравнение (61)). Но поскольку всякая наблюдаемая выражается некоторой алгебраической функцией от p и q , мы приходим к общему заключению: любая

физическая величина $A(q; p)$ в волновой механике представляется оператором $A\left(q; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right)$.

В качестве примера рассмотрим энергию H . Если предположить, что потенциальная энергия не зависит от времени, то наблюдаемая H имеет вид

$$H(q; p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q_1, \dots, q_N).$$

Матрица, задающая энергию в представлении $\{q\}$, имеет форму:

$$\begin{aligned} \langle q' | H | q'' \rangle &= H\left(q'; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'}\right) \delta(q' - q'') = \\ &= \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \right) \frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} + V(q') \right] \delta(q' - q''). \end{aligned}$$

Выражение в квадратных скобках является оператором, действующим на $\delta(q' - q'')$ как функцию q' . Следовательно, вектор $H|\psi\rangle$ представляется волновой функцией:

$$\langle q' | H | \psi \rangle = H\psi(q') = \left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} + V(q') \right] \psi(q').$$

Если, наконец, в «представлении» Шредингера, написать фундаментальное уравнение движения (35) в представлении $\{q\}$, то мы получим уравнение Шредингера в его обычной форме

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q; t) = H\psi(q; t).$$

Это завершает доказательство того, что волновая механика представляет собой, формулировку квантовой теории в представлении $\{q\}$ и «представлении» Шредингера.

§ 17. Представление $\{p\}$

В качестве следующего примера возьмем представление $\{p\}$, в котором диагональными являются составляющие импульса. Пусть $|p'\rangle \equiv |p'_1\rangle |p'_2\rangle \dots |p'_N\rangle$ суть базисные векторы этого представления. Это общие собственные векторы наблюдаемых $p_1, p_2, \dots, p_N$, принадлежащие собственным значениям $p'_1, p'_2, \dots, p'_N$. Будем предполагать, что они ортонормированы

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p''),$$

и удовлетворяют соотношению замкнутости

$$P_p \equiv \int |p'\rangle dp' \langle p'| = 1$$

(мы используем здесь сокращенные обозначения индексов, подобно §§ 7, 16).

Согласно результатам § 6 волновая функция вектора $|p'\rangle$ в представлении $\{q\}$ есть

$$\langle q' | p' \rangle \equiv \prod_{i=1}^N \langle q'_i | p'_i \rangle = (2\pi\hbar)^{-N/2} e^{\frac{i}{\hbar} (p'_1 q'_1 + \dots + p'_N q'_N)}.$$

Эта величина $\langle p' | q' \rangle = \langle q' | p' \rangle^*$, если ее рассматривать как функцию q' и p' , является элементом унитарной матрицы S , преобразующей матрицы представления $\{q\}$ в матрицы представления $\{p\}$. Кет-вектор $|\psi\rangle$ в этом последнем представлении описывается «волновой функцией в импульсном пространстве»

$$\Phi(p') \equiv \langle p' | \psi \rangle.$$

Очевидно, что $\Phi(p')$ есть образ Фурье (соответствующим образом нормированный) волновой функции $\Psi(q') \equiv \langle q' | \psi \rangle$ в конфигурационном пространстве:

$$\begin{aligned} \Phi(p') &= \langle p' | \psi \rangle = \int \langle p' | q' \rangle dq' \langle q' | \psi \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}} \int \Psi(q') e^{-\frac{i}{\hbar} (p'_1 q'_1 + \dots + p'_N q'_N)} dq'. \end{aligned}$$

Нетрудно проверить (это можно сделать и непосредственно), что действие оператора p_n на функцию $\Phi(p')$ сводится к умножению на p'_n , а действие оператора q_n выражается взятием частной производной $i\hbar \partial / \partial p'_n$.

Для иллюстрации выпишем в представлении $\{p\}$ уравнение Шредингера для частицы с массой m в поле статического потенциала $V(r)$. Энергия системы представляется наблюдаемой

$$H(r, p) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Базисные векторы $|p'\rangle$ зависят от трех компонент импульса p'_x, p'_y, p'_z и удовлетворяют условиям ортонормированности и замкнутости:

$$\delta(p' - p'') \equiv \delta(p'_x - p''_x) \delta(p'_y - p''_y) \delta(p'_z - p''_z) = \langle p' | p'' \rangle,$$

$$P_p \equiv \int |p'\rangle dp' \langle p'| = 1.$$

Унитарная матрица S , преобразующая матрицы представления $\{r\}$ в матрицы представления $\{p\}$, дается формулой

$$\langle p' | r' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar} p' r'}.$$

Поэтому элементы матрицы $V(r)$ в представлении $\{p\}$ можно записать в явном виде так:

$$\begin{aligned}\langle p' | V | p'' \rangle &= \int \int \langle p' | r' \rangle dr' \langle r' | V(r) | r'' \rangle dr'' \langle r'' | p'' \rangle = \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' r'} dr' V(r') \delta(r' - r'') dr'' e^{\frac{i}{\hbar} p'' r''} = \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int V(r') e^{-\frac{i}{\hbar} (p' - p'') r'} dr' .\end{aligned}$$

Положим

$$\mathcal{V}(\omega) = (2\pi\hbar)^{-3} \int V(r) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega r} dr ,$$

тогда

$$\langle p' | V | p'' \rangle = \mathcal{V}(p' - p'') ,$$

так что элементы матрицы оператора H в представлении $\{p\}$ записываются в форме

$$\langle p' | H | p'' \rangle = \frac{p'^2}{2m} \delta(p' - p'') + \mathcal{V}(p' - p'') .$$

Пусть $\Phi(p')$ есть волновая функция в импульсном пространстве динамического состояния $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\Phi(p') &= \langle p' | \psi \rangle = \int \langle p' | r' \rangle dr' \langle r' | \psi \rangle = \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar} p' r'} \Psi(r') dr' .\end{aligned}$$

Тогда уравнение Шредингера, имеющее в волновой механике вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r; t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \Psi(r; t) ,$$

в представлении $\{p\}$ принимает форму интегро-дифференциального уравнения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p; t) = \frac{p^2}{2m} \Phi(p; t) + \int \mathcal{V}(p - p') \Phi(p'; t) dp' .$$

§ 18. Пример: движение свободного волнового пакета

В качестве приложения вышесприведенных результатов изучим движение свободного волнового пакета ($V = 0$).

Пусть $|\psi\rangle$ есть вектор состояния в момент времени $t = 0$, а $\psi(r)$ и $\Phi(p)$ — волновые функции, выражающие этот вектор в представлениях $\{r\}$ и $\{p\}$ соответственно. В момент времени t динамическое состояние системы дается вектором

$$|\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi\rangle ,$$

где $H \equiv p^2/2m$ есть гамильтониан свободной частицы. Поскольку импульс является постоянной движения, его среднее значение остается неизменным во времени; то же самое верно относительно групповой скорости

$$v = \langle p \rangle / m.$$

Мы знаем, что распылением пакета можно пренебречь при достаточно малых промежутках времени (§ VI.3). Уточним здесь этот результат и покажем, что при выполнении условий слабого распыливания волновой пакет распространяется практически без искажений и может быть в очень хорошем приближении описан функцией $\psi(r - vt)$.

Эта приближенная волновая функция представляет вектор

$$|\bar{\Psi}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} pvt} |\Psi\rangle,$$

в чем нетрудно убедиться, используя и обобщая свойство (16) или исследуя соответствующую волновую функцию в представлении $\{p\}$. Приближение тем лучше, чем ближе к единице вероятность для системы находится в состоянии $|\bar{\Psi}\rangle$; иными словами, необходимо, чтобы

$$1 - |\langle \Psi | \bar{\Psi} \rangle|^2 \ll 1.$$

Заменяя $|\Psi\rangle$ и $|\bar{\Psi}\rangle$ выражениями, приведенными выше, находим

$$|\langle \Psi | \bar{\Psi} \rangle| = \left| \langle \Psi | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{(p - mv)^2}{2m} t\right) | \Psi \rangle \right|.$$

Матричный элемент в правой части просто вычислить в представлении $\{p\}$; получаем

$$\langle \Psi | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{(p - mv)^2}{2m} t\right) | \Psi \rangle = \int |\varphi(p)|^2 e^{i \frac{(p - mv)^2}{2m\hbar} t} dp.$$

Если предположить, что мы имеем дело с волновым пакетом типа приведенного на рис. 17, то функция $\varphi(p)$ имеет острый максимум линейных размеров Δp около среднего значения $p = mv$; Δp есть модуль вектора Δp , дающего среднее квадратичное отклонение импульса частицы p . В этом предположении экспонента в правой части равенства близка к единице в области максимума, т. е. при

$$\frac{(\Delta p)^2 t}{2m\hbar} \ll 1$$

или

$$\frac{\Delta p}{m} t \ll \frac{2\hbar}{\Delta p}.$$

Приближение справедливо, пока выполнено это условие. Но это неравенство выражает условие:

распыливание $\ll$ ширины пакета,

которое мы уже получили при изучении распыливания волнового пакета в § VI.3 (условие (VI.15)).

§ 19. Другие представления. Представление, в котором диагональна энергия

Примеры, приведенные выше, показывают, что уравнения теории имеют различную форму в зависимости от выбранного представления; ввиду этого и вычисления в разных представлениях могут быть существенно различными.

Среди представлений квантовой теории некоторые оказываются особенно удобными при рассмотрении консервативных систем из-за простой формы уравнения Шредингера: это те представления, в которых энергия H диагональна⁹⁾. Базисные векторы $|E\alpha\rangle$ такого представления отмечаются собственным значением энергии E и набором α собственных значений других постоянных или интегралов движения, которые вместе с H составляют полный набор наблюдаемых. Вектор $|\psi(t)\rangle$ «представления» Шредингера, описывающий динамическое состояние системы, в этом представлении дается «волновой функцией»

$$\psi(E, \alpha; t) \equiv \langle E\alpha | \psi(t) \rangle,$$

которая удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(E, \alpha; t) = \langle E\alpha | H | \psi(t) \rangle = E\psi(E, \alpha; t).$$

Таким образом, имеем

$$\psi(E\alpha; t) = \psi(E\alpha; t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)}.$$

Зная вектор состояния $\{E\alpha\}$ в начальный момент времени, легко определить его эволюцию с течением времени. На практике вектор в начальный момент времени часто дается в другом представлении, например, представлении $\{q\}$. Уравнение движения будет, следовательно, решено, если мы сумеем перейти от представления $\{q\}$ к представлению, где H диагонален. С математической точки зрения задача построения унитарной матрицы, обеспечивающей эту смену представления, эквивалентна задаче о собственных значениях оператора H в представлении $\{q\}$, т. е. решению в этом представлении стационарного уравнения Шредингера.

Раздел IV. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

§ 20. Системы с неполной информацией и смешанные состояния

Когда динамическое состояние системы известно не полностью, некоторые предсказания о ее поведении все же могут быть сделаны, если прибегнуть к обычным статистическим методам. Обсуждение этого вопроса, начатое в гл. V (§ 16), без труда можно изложить в рамках общего формализма.

⁹⁾ В своей первоначальной форме матричная механика Борна, Гейзенберга и Иордана была частной формулировкой квантовой теории в «представлении» Гейзенберга, выраженной в представлении, где диагональна энергия.

Динамическое состояние квантовой системы известно полностью, если удалось точно определить значения переменных, составляющих какой-либо полный набор совместных наблюдаемых; в этом случае состояние системы может быть представлено некоторым вектором $|\chi\rangle$. Если же сведения, которыми мы располагаем относительно системы, не являются полными, то можно только указать некоторые вероятности $p_1, p_2, \dots, p_m \dots$ того, что система находится в динамических состояниях, представляемых кет-векторами $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots$. Иначе говоря, состояние системы представляется не единственным вектором, а статистической смесью векторов.

Предположим, что мы измеряем некоторую величину A . Среднее значение $\langle A \rangle$ результатов измерения имеет вероятность p_m быть равным $\langle A \rangle_m = \langle m|A|m\rangle / \langle m|m\rangle$. Поэтому, предполагая, что векторы $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots$ нормированы на единицу, можно написать

$$\langle A \rangle = \sum_m p_m \langle m|A|m\rangle. \quad (62)$$

Та же формула дает среднее значение произвольной функции $F(A)$, если заменить A на $F(A)$; отсюда мы получаем статистическое распределение результатов измерения.

§ 21. Матрица плотности¹⁰⁾

Смешанные состояния особенно удобно описывать с помощью оператора

$$\rho = \sum_m |m\rangle p_m \langle m|. \quad (63)$$

В этом выражении векторы $|m\rangle$ нормированы на единицу (но не обязательно ортогональны), а величины p_m имеют характерные свойства статистических весов, т. е.

$$p_m \geq 0, \quad \sum_m p_m = 1. \quad (64)$$

Оператор ρ называется *матрицей плотности* или *статистическим оператором*.

Среднее значение наблюдаемой A есть след ρA

$$\langle A \rangle = \text{Sp } \rho A. \quad (65)$$

Действительно,

$$\text{Sp } \rho A = \sum_m p_m \text{Sp } (|m\rangle \langle m| A),$$

¹⁰⁾ Полное изложение свойств матрицы плотности можно найти в работе U. Fano, Rev. Mod. Phys. 29, 74 (1957).

и чтобы доказать эквивалентность формул (62) и (65) достаточно показать, что

$$\text{Sp}(|m\rangle\langle m|A) = \langle m|A|m\rangle.$$

Поскольку оператор $P_m = |m\rangle\langle m|$ есть оператор проектирования и его след равен 1 (уравнение (VII.88)), имеем

$$\begin{aligned}\text{Sp} P_m A &= \text{Sp} P_m A = \text{Sp} P_m A P_m = \text{Sp} |m\rangle\langle m| A |m\rangle\langle m| = \\ &= \langle m|A|m\rangle \text{Sp} P_m = \langle m|A|m\rangle.\end{aligned}$$

Те же выкладки, но в случае $A = 1$, дают условие нормировки

$$\text{Sp} \rho = 1.$$

Конечно все эти выводы относятся и к любой функции наблюдаемой A , так что можно написать

$$\langle F(A) \rangle = \text{Sp} \rho F(A).$$

Зная ρ , можно вывести статистическое распределение результатов измерения A .

Если P_D — оператор проектирования на подпространство, натянутое на собственные векторы A , принадлежащие собственным значениям, располагающимся в некоторой области D спектра A , то вероятность w_D найти результат измерения в области D есть $\sum_m p_m \langle m|P_D|m\rangle$ (см. уравнение (5)), т. е.

$$w_D = \text{Sp} \rho P_D. \quad (66)$$

В частности, вероятность найти систему в квантовом состоянии, представляемом вектором $|\chi\rangle$ (с нормой, равной 1), есть

$$w_\chi = \text{Sp} (\rho |\chi\rangle\langle\chi|) = \langle\chi|\rho|\chi\rangle. \quad (67)$$

Задания оператора ρ вполне достаточно для вычисления всех измеряемых на опыте величин, их средних значений и статистических распределений результатов измерения, поэтому в дальнейшем мы будем считать вполне одинаковыми два смешанных состояния, имеющих одну матрицу плотности: всякое смешанное состояние полностью определяется своей матрицей плотности.

Чтобы завершить исследование случая смешанных состояний и применения к нему постулатов § 2, остается выяснить, какая матрица плотности представляет динамическое состояние системы после окончания некоторого измерения. Ограничимся, как и в § 2, случаем идеального измерения. Если измерение показало, что система находится в собственном состоянии наблюдаемой A , принадлежащем некоторой области спектра D , то матрица плотности после измерения равна с точностью до нормиро-

вочной постоянной проекции $P_D \rho P_D$ оператора ρ , который представлял смешанное состояние до измерения. Соответствующая постоянная должна находиться из условия равенства единице следа оператора; таким образом, она равна величине, обратной $\text{Sp } P_D \rho P_D = \text{Sp } \rho P_D = \omega_D$. Изменение (некаузальное) матрицы плотности в процессе измерения может быть поэтому выражено схемой ¹¹⁾

$$\rho \rightarrow \text{идеальное измерение, дающее результат } D \rightarrow \frac{P_D \rho P_D}{\text{Sp } \rho P_D}.$$

§ 22. Эволюция смешанного состояния во времени

Для начала обратимся к «представлению» Шредингера. Предположим, что в момент времени t_0 динамическое состояние системы представляется статистической смесью векторов (с нормой 1) $|1\rangle_0, |2\rangle_0, \dots, |m\rangle_0, \dots$ со статистическими весами $p_1, p_2, \dots, p_m, \dots$. Каждый член смеси эволюционирует согласно закону

$$|m\rangle_t = U(t, t_0) |m\rangle_0,$$

и в момент времени t система представляется смесью векторов $|1\rangle_t, |2\rangle_t, \dots, |m\rangle_t, \dots$ с теми же статистическими весами $p_1, p_2, \dots, p_m, \dots$. Оператор эволюции $U(t, t_0)$ определен в § 8.

Отсюда можно получить закон эволюции оператора плотности:

$$\begin{aligned} \rho_t &= \sum_m |m\rangle_t p_m \langle m| = \sum_m U(t, t_0) |m\rangle_0 p_m \langle m| U^\dagger(t, t_0) = \\ &= U(t, t_0) \left(\sum_m |m\rangle_0 p_m \langle m| \right) U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \rho_0 U^\dagger(t, t_0). \end{aligned}$$

Оператор матрицы плотности в момент времени t получается из оператора матрицы плотности в начальный момент с помощью унитарного преобразования $U(t, t_0)$.

Принимая во внимание уравнение эволюции оператора U (32) и эрмитово сопряженное уравнение, находим

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_t = [H, \rho_t]. \quad (68)$$

Это уравнение Шредингера для матрицы плотности. Его не следует смешивать с уравнением Гейзенберга (40), несмотря на формальное сходство (отличие только в знаке перед коммута-

¹¹⁾ Чтобы оправдать это расширение постулата редукции волнового пакета, следует обратиться к детальному исследованию механизма измерения в квантовой механике. См. по этому поводу литературу, цитированную в сноске IV.¹⁰⁾ см. также работу У. Фано (*U. Fano, loc. cit.*).

тором). Величины, входящие в уравнение (68), являются операторами в «представлении» Шредингера.

Переход от «представления» Шредингера к «представлению» Гейзенберга осуществляется при помощи унитарного преобразования $U^+(t, t_0)$. Вследствие этого в «представлении» Гейзенберга оператор матрицы плотности остается «неподвижным» ($\rho_H = \rho_0$), в то время как наблюдаемые изменяются во времени, следуя уравнению Гейзенберга (40).

§ 23. Характеристические свойства матрицы плотности

Оператор матрицы плотности ρ является *положительно определенным эрмитовым* оператором (ср. § VII.8), след его равен 1.

Действительно, исходя из самого определения ρ по уравнению (63), находим при любых $|u\rangle$

$$\langle u | \rho | u \rangle = \sum_m \rho_m |\langle u | m \rangle|^2 \geq 0, \quad (69)$$

$$\text{Sp } \rho = \sum_m \rho_m \text{Sp } (|m\rangle\langle m|) = \sum_m \rho_m = 1. \quad (70)$$

Кроме того, поскольку все ρ_m положительны и поскольку (неравенство Шварца) $|\langle u | m \rangle|^2 \leq \langle u | u \rangle$, имеем

$$\langle u | \rho | u \rangle \leq \langle u | u \rangle. \quad (71)$$

Иначе говоря, оператор $1 - \rho$ также является положительно определенным.

В общей теории гильбертова пространства показывается, что положительно определенный эрмитов оператор с конечным следом является наблюдаемой с чисто дискретным спектром. Собственные значения ρ все заключены между 0 и 1.

Обратно, *всякий положительно определенный эрмитов оператор ρ со следом 1 можно рассматривать как оператор матрицы плотности.* Действительно, такой оператор есть наблюдаемая и его можно записать в виде

$$\rho = \sum_n \omega_n P_n, \quad (72)$$

где $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n, \dots$ — отличные от нуля собственные значения, а $P_1, P_2, \dots, P_n, \dots$ — операторы проектирования на соответствующие подпространства. Если ни одно из собственных значений не вырождено, то каждое P_n есть элементарный проектор $P_n = |\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|$, так что

$$\rho = \sum_n \omega_n |\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|. \quad (73)$$

Поскольку $\sum_n \omega_n = \text{Sp } \rho$ и $\omega_n = \langle \bar{n} | \rho | \bar{n} \rangle \geq 0$, величины ω_n обладают свойствами статистических весов

$$\omega_n \geq 0, \quad \sum_n \omega_n = 1,$$

следовательно, ρ есть оператор плотности смешанного состояния, образованного из векторов $|\bar{n}\rangle$ со статистическими весами ω_n ¹²⁾. Читатель может сам распространить это рассуждение на случай, когда некоторые собственные значения ρ оказываются вырожденными.

§ 24. Чистые состояния

Формализм оператора матрицы плотности позволяет рассматривать чистые состояния как частные случаи смешанных состояний.

Если известно, что система находится в чистом состоянии $|\chi\rangle$, то можно представлять это состояние как смешанное, но с одним единственным членом смеси $|\chi\rangle$ (по предположению нормированном на 1); оператором матрицы плотности явится проектор

$$\rho_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|, \quad (74)$$

при этом

$$\rho_\chi^2 = \rho_\chi. \quad (75)$$

Обратно, если оператор матрицы плотности есть проектор, он представляет чистое состояние; это то состояние, на которое совершается проектирование.

Можно дать два других критерия, позволяющих выяснить, представляет ли оператор матрицы плотности чистое состояние:

1°. Оператор матрицы плотности ρ может быть представлен в виде линейной комбинации проекторов разными способами: выражение (63) не единственно. Но чтобы оператор ρ , определенный уравнением (63), представлял чистое состояние, необходимо (и достаточно), чтобы все $|m\rangle$ были равны между собой с точностью до фазы; тогда они представляют одно и то же динамическое состояние, которое и является искомым чистым состоянием (задача 7).

2°. Всякий оператор матрицы плотности ρ , т. е. всякий положительно определенный эрмитов оператор со следом, равным 1, обладает свойством

$$\text{Sp } \rho^2 \leq 1.$$

¹²⁾ В формуле (73) векторы $|\bar{n}\rangle$ попарно ортогональны. Однако векторы $|m\rangle$, фигурирующие в (63), могут и не обладать этим свойством.

Чтобы он представлял чистое состояние *достаточно* (и необходимо), чтобы (задача 8)

$$\text{Sp } \rho^2 = 1. \quad (76)$$

В заключение укажем, что *всегда можно представлять динамическое состояние системы с помощью оператора матрицы плотности, независимо от того, полные или неполные сведения мы имеем об этом состоянии*. Задание этого оператора позволяет определить все физически измеряемые величины, которые должна дать квантовая теория; при этом уравнение (66) играет ту же роль, что и уравнение (5) при векторном представлении состояний. Этот метод имеет то преимущество, что он позволяет единым образом рассматривать как чистые, так и смешанные состояния. Кроме того, *оператор матрицы плотности, представляющий состояние системы, определяется единственным образом*, в то время как вектор, представляющий чистое состояние, определен только с точностью до фазового множителя, а определение смеси векторов, представляющих состояние с неполной информацией, допускает еще больший произвол.

§ 25. Классическая статистика и квантовая статистика

В классической механике динамическое состояние определяется точкой в фазовом пространстве; статистическая смесь состояний представляется некоторым «флюидом» в фазовом пространстве, плотность которого $\rho_{\text{кл}}$ в точке равна вероятности найти систему в состоянии, определяемом этой точкой.

Существует замечательный параллелизм между плотностью в фазовом пространстве $\rho_{\text{кл}}$ и оператором матрицы плотности ρ квантовой теории. Плотность $\rho_{\text{кл}}$ является вещественной положительной величиной, причем интеграл от нее по всему фазовому пространству равен единице

$$\int \rho_{\text{кл}} dq dp = 1; \quad (77)$$

с другой стороны, ρ есть эрмитов оператор с положительными собственными значениями (положительно определенный оператор), след которого равен 1.

Зная $\rho_{\text{кл}}$ в некоторый момент времени, можно получить среднее значение $\langle A \rangle_{\text{кл}}$ любой функции $A_{\text{кл}}$ динамических переменных q и p , интегрируя $\rho_{\text{кл}} A_{\text{кл}}$ по всему фазовому пространству

$$\langle A \rangle_{\text{кл}} = \iint \rho_{\text{кл}} A_{\text{кл}} dq dp. \quad (78)$$

Эволюция $\rho_{\text{кл}}$ во времени дается уравнением

$$\frac{\partial \rho_{\text{кл}}}{\partial t} = \{H_{\text{кл}}, \rho_{\text{кл}}\} \quad (79)$$

(это уравнение не следует смешивать с уравнением (42)).

Уравнения (78) и (79) являются классическими аналогами уравнений (65) и (68) соответственно. Мы переходим от выражений классической теории к выражениям теории квантовой, заменяя обычные величины наблюдаемыми, скобки Пуассона — коммутаторами (с учетом множителя $i\hbar$), а *интегрирование по всему фазовому пространству* заменяется *операцией вычисления следа оператора*.

Эта новая формулировка принципа соответствия оказывается чрезвычайно полезной при распространении на квантовую область основных результатов классической статистической термодинамики. Большинство классических выводов могут быть воспроизведены без изменения. Ограничимся тем, что укажем основные результаты.

Состояние квантовой системы в *термодинамическом равновесии* при температуре T представляется оператором

$$\rho = Ne^{-H/kT}, \quad (80)$$

где H — гамильтониан системы, k — постоянная Больцмана. Постоянная нормировки определяется из условия $\text{Sp } \rho = 1$. Различные термодинамические функции системы вычисляются, как и в классической теории, с помощью *статистической суммы*

$$Z(\mu) = \text{Sp } e^{-\mu H}. \quad (81)$$

Так, для свободной энергии $\mathcal{F}$, энтропии S и энергии E получаем следующие выражения, записанные для $\mu = 1/kT$:

$$\mathcal{F} = -kT \ln Z, \quad (82)$$

$$S = k \left(\ln Z - \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z \right), \quad (83)$$

$$E = \langle H \rangle = - \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z. \quad (84)$$

Энтропия системы согласно принципу соответствия, вообще говоря, равна среднему значению оператора $-k \ln \rho$; это значит

$$S = -k \text{Sp } (\rho \ln \rho). \quad (85)$$

Равновесное распределение (80) получается без труда: это распределение, соответствующее заданному среднему значению энергии, для которого энтропия имеет максимальное значение.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Вывести из основного постулата о средних значениях выражение (5) для закона распределения вероятностей результатов измерения данной величины.

2. Рассматривается квантовая система, обладающая одномерным классическим аналогом. Вывести из соотношения коммутации $[q, p] = i\hbar$, что спектр p — непрерывный, простой и заполняет интервал $(-\infty, +\infty)$. Соответствующим образом нормированные собственные векторы p образуют полную ортонормированную систему в $\mathcal{E}$. Показать, что при подходящем выборе фаз векторов $|p'\rangle$ этой системы действие унитарного оператора $\exp(i\omega q/\hbar)$ (ω — произвольная постоянная) на эти векторы дает

$$\exp(i\omega p/\hbar) |p'\rangle = |p' + \omega\rangle,$$

и что матричные элементы q даются формулой

$$\langle p' | q | p'' \rangle = i\hbar \delta'(p' - p'').$$

Решить проблему собственных значений q в этом представлении.

3. Производная оператора $A(\xi)$, зависящего явно от непрерывного параметра ξ , по определению равна

$$\frac{dA}{d\xi} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{A(\xi + \varepsilon) - A(\xi)}{\varepsilon}.$$

Показать, что:

1°. Если $A(\xi)$ есть функция наблюдаемой или нескольких коммутирующих наблюдаемых, то производная находится по обычным правилам дифференцирования. В частности, если O — наблюдаемая, то

$$\frac{d}{d\xi} (e^{iO\xi}) = iOe^{iO\xi}.$$

2°. Если два оператора дифференцируемы, то

$$\frac{d}{d\xi} (AB) = \frac{dA}{d\xi} B + A \frac{dB}{d\xi},$$

в частности,

$$\frac{d}{d\xi} A^2 = \frac{dA}{d\xi} A + A \frac{dA}{d\xi}.$$

3°. Если A дифференцируем и обладает обратным оператором, то

$$\frac{d}{d\xi} A^{-1} = -A^{-1} \frac{dA}{d\xi} A^{-1}.$$

4. Показать, что оператор $B(t)$, определяемый выражением

$$B(t) = e^{iAt} B_0 e^{-iAt},$$

где A и B_0 суть операторы, не зависящие от времени, является решением интегрального уравнения

$$B(t) = B_0 + i \left[A, \int_0^t B(\tau) d\tau \right].$$

Решая это уравнение методом итераций, можно получить разложение оператора $B(t)$ по степеням t . Доказать операторное тождество

$$e^{iA} B e^{-iA} = B + i[A, B] + \frac{i^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \\ \dots + \frac{i^n}{n!} \overbrace{[A, [A, \dots [A, [A, B]] \dots]]}^{n \text{ скобок}} + \dots.$$

Замечание. Условимся рассматривать $[A, B]$ как оператор, получающийся при действии A на B , и обозначим этот оператор символом $A\{B\}$, тогда $A^n\{B\}$ выражает действие A , повторенное n раз. Согласно этим обозначениям

$$A^0\{B\} = B, \quad A\{B\} = [A, B], \quad A^2\{B\} = [A, [A, B]] \text{ и т. д.,}$$

поэтому тождество можно записать в форме

$$e^{iA} B e^{-iA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} A^n\{B\}.$$

5. Пусть $A(\xi)$ — оператор, зависящий от непрерывного параметра ξ , $dA/d\xi$ — производная оператора по ξ . Доказать операторное тождество

$$e^{-iA} \frac{d}{d\xi} e^{iA} = i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+1)!} A^n \left\{ \frac{dA}{d\xi} \right\}$$

(обозначения из замечания к задаче 4).

6. Если оператор $U(t)$, дифференцируемый по t , унитарен, то оператор

$$H(t) = i\hbar \frac{dU}{dt} U^\dagger$$

будет эрмитов. Обратно, если $U(t)$ подчиняется уравнению

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = HU,$$

где H есть эрмитов оператор, возможно зависящий от t , то $U^\dagger U$ не зависит от времени t , а $UU^\dagger$ есть решение уравнения

$$i\hbar \frac{d}{dt} UU^\dagger = [H, UU^\dagger].$$

В частности, если U унитарен при $t = t_0$, то он остается унитарным при любых t .

7. Пусть $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |M\rangle$ — последовательность векторов с нормой 1, но не обязательно ортогональных. Показать, что необходимым и достаточным условием того, что оператор матрицы плотности

$$\rho = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |i\rangle\langle i|$$

представляет чистое состояние, является равенство всех векторов с точностью до фазового множителя.

8. Показать, что для того, чтобы положительно определенный эрмитов оператор ρ со следом 1 представлял чистое состояние, необходимо и достаточно, чтобы $\text{Sp } \rho^2 = 1$.

Премудрость построила себе дом, вытесала
семь столбов его,
Заколола жертву, смешала вино с водой
и приготовила у себя трапезу;
Послала слуг своих провозгласить
с возвышенностей городских:
«Тот, кто прост, обратись сюда!»

Притчи, IX, 1—4.

ЧАСТЬ II

ПРОСТЫЕ СИСТЕМЫ

**РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
МЕТОДОМ РАЗДЕЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ.
ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ**

§ 1. Введение

Исследование физической системы по существу сводится к решению соответствующего стационарного уравнения Шредингера. В частности, с этим уравнением мы сталкиваемся при решении двух наиболее часто встречающихся задач квантовой физики, а именно:

а) определения уровней энергии связанных состояний, т. е. собственных значений дискретного спектра гамильтониана;

б) вычисления эффективных поперечных сечений рассеяния — как будет показано ниже (гл. X), они находятся при исследовании асимптотической формы собственных функций, принадлежащих непрерывному спектру.

Уравнение Шредингера волновой механики является уравнением в частных производных второго порядка. Для одномерной системы оно сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению; исследование проблемы собственных значений в этом простом случае уже было проведено в гл. III. Задача становится гораздо более трудной, если физическая система обладает многими степенями свободы. Однако свойства симметрии, которыми может обладать гамильтониан, существенно облегчает решение уравнения. Может оказаться, что удачная замена переменных приведет к уравнению в частных производных с разделяющимися переменными; задача на собственные значения в этом случае распадается на несколько задач с меньшим числом переменных, т. е. более простых.

Именно это имеет место при решении задачи о частице, движущейся в центрально-симметричном потенциальном поле, когда потенциал зависит только от расстояния до центра r , но не от направления радиуса-вектора $\mathbf{r}$. Если гамильтониан обладает сферической симметрией, то переменные полностью разделяются в сферических координатах; после отделения угловых переменных уравнение Шредингера сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению относительно радиальной переменной, которое всегда может быть проинтегрировано, хотя бы численными методами.

Основная часть этой главы посвящена решению уравнения Шредингера для частицы в центрально-симметричном потенциальном поле. Общее обсуждение задачи проводится в разделе I. В разделе II рассматривается задача о свободной частице и частице в центрально-симметричной потенциальной яме.

В разделе III исследуется еще один простой пример разделения переменных при описании движения центра масс системы частиц; как и в классической механике, это движение отделяется от относительного движения, если взаимодействие между частицами зависит только от относительного расстояния между ними.

Раздел I. ЧАСТИЦА В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

§ 2. Гамильтониан частицы в сферических координатах

В этом разделе мы изучим уравнение Шредингера для частицы с массой m , движущейся в поле центрально-симметричного потенциала $V(r)$. Если $\mathbf{p}$ — импульс частицы, а $\mathbf{r}$ — ее радиус-вектор, то гамильтониан частицы выражается формулой

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad (1)$$

и тогда стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$H\psi(\mathbf{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Ввиду того, что гамильтониан обладает сферической симметрией, проведем исследование в сферических координатах.

В качестве полярной оси, как обычно, выберем ось z , тогда декартовы координаты (x, y, z) выражаются через сферические координаты (r, θ, φ) известными формулами (см. рис. 27):

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta. \quad (I)$$

Выражение для потенциальной энергии V в сферических координатах нам дано; надо найти выражение для кинетической энергии $\mathbf{p}^2/2m$, иначе говоря, выразить в сферических координатах дифференциальный оператор

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Это можно сделать непосредственно с помощью формул преобразования (I). Вычисление довольно длинно, но не представляет серьезных трудностей; мы не будем его здесь приводить. Вместо этого, чтобы лучше понять физический смысл результата, мы попытаемся выразить кинетическую энергию $\mathbf{p}^2/2m$ не через дифференциальные операторы $\partial/\partial r$, $\partial/\partial \theta$, $\partial/\partial \varphi$, а через построен-

ные из этих дифференциальных операторов эрмитовы операторы, которые имеют более наглядный физический смысл.

Так, вместо того, чтобы использовать дифференциальный оператор $\partial/\partial\varphi$, удобнее иметь дело с z -компонентой момента импульса, которая согласно уравнению (V.49) выражается формулой

$$l_z \equiv x p_y - y p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (3)$$

Поскольку $V(r)$ не зависит от φ , очевидно, что l_z коммутирует с потенциальной энергией. Однако l_z коммутирует также и с кинетической энергией $p^2/2m$, что можно легко проверить (задача 4), пользуясь определением l_z и соотношениями коммутации¹⁾

$$[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (4)$$

Таким образом, l_z коммутирует с гамильтонианом H . Выбирая в качестве полярных осей оси Ox и Oy , можно прийти к тому же заключению относительно l_x и l_y . Следовательно *три составляющие l_x, l_y, l_z момента импульса*

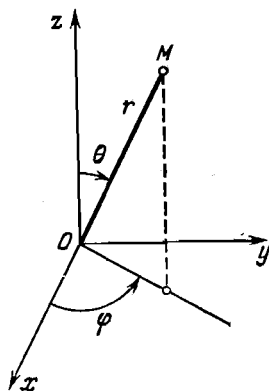


Рис. 27. Сферические и декартовы координаты.

$$l \equiv [r p] = \frac{\hbar}{i} [r \nabla] \quad (5)$$

коммутируют с гамильтонианом. По этой причине мы будем использовать именно эти операторы, а не операторы $\partial/\partial\theta$, $\partial/\partial\varphi$.

По тем же соображениям мы используем радиальный импульс

$$p_r \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (6)$$

вместо оператора $-i\hbar \partial/\partial r$, который не является эрмитовым (см. задачу 1).

Чтобы уточнить свойство эрмитовости p_r , выясним при каких условиях среднее $\langle \psi, p_r \psi \rangle$, где $\psi(r)$ квадратично интегрируемая функция, является вещественным. Мы должны иметь

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi, p_r \psi \rangle - \langle \psi, p_r \psi \rangle^* \equiv \int [\psi^* (p_r \psi) - (p_r \psi)^* \psi] dr = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \left[\frac{\partial}{\partial r} |r\psi|^2 \right] dr. \end{aligned}$$

¹⁾ В дальнейшем индексы $i, j = 1, 2, 3$ служат для обозначения компонент векторов в декартовых координатах Ox, Oy, Oz ; так, например, $r_i \equiv x_i$, $p_i \equiv p_{x_i}$ и т. д.

Поскольку $r\psi$ обращается в нуль при $r \rightarrow \infty$, мы должны выяснить поведение функции ψ в начале координат. Очевидно, что оператор p_r является эрмитовым только, если ограничиться квадратично интегрируемыми функциями, которые подчиняются дополнительному условию ²⁾

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\psi(r) = 0. \quad (7)$$

Из определения p_r следует, что этот оператор коммутирует с любой функцией θ и φ , а также с тремя компонентами $\mathbf{l}$, но

$$[r, p_r] = i\hbar. \quad (8)$$

Существует операторное тождество

$$p^2 = p_r^2 + \mathbf{l}^2/r^2 \quad (r \neq 0), \quad (9)$$

согласно которому действие на функцию $\psi(r)$ операторов p^2 и $p_r^2 + (\mathbf{l}^2/r^2)$ дает одинаковый результат при $r \neq 0$.

Чтобы его доказать, применим для вычисления $\mathbf{l}^2$ тождество

$$[\mathbf{AB}]^2 = \mathbf{A}^2\mathbf{B}^2 - (\mathbf{AB})^2,$$

подставляя вместо векторов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ операторы $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$. Разумеется, поскольку компоненты $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ не обязательно коммутируют между собой, это тождество остается справедливым только при сохранении порядка следования операторов, именно

$$\mathbf{l}^2 \equiv [\mathbf{rp}][\mathbf{rp}] = \sum_{i,j} (r_i p_j r_i p_j - r_i p_j r_j p_i).$$

Повторное применение коммутационных соотношений (4) позволяет переписать это тождество в виде

$$\mathbf{l}^2 = \mathbf{r}^2 p^2 - (\mathbf{rp})^2 + i\hbar \mathbf{rp}, \quad (10)$$

но поскольку $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, $x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} = r \frac{\partial}{\partial r}$, следовательно,

$$\mathbf{rp} = r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} = r p_r + i\hbar$$

и, учитывая соотношение коммутации (8), получаем

$$(\mathbf{rp})^2 - i\hbar (\mathbf{rp}) \equiv (\mathbf{rp} - i\hbar)(\mathbf{rp}) = r p_r (r p_r + i\hbar) = r^2 p_r^2.$$

²⁾ Оператор p_r эрмитов, но не является наблюдаемой. Какой бы ни была постоянная ω , решение дифференциального уравнения

$$p_r f(r) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r f(r)) = \omega f(r)$$

есть, с точностью до постоянного множителя, $\exp(i\omega r/\hbar)/r$. Это решение не удовлетворяет условию (7); задача на собственные значения p_r не имеет решения (Оператор p_r эрмитов (симметричен) на функциях, удовлетворяющих условию (7), но его нельзя расширить до самосопряженного — Прим. перев.).

Правая часть тождества (10) поэтому равна $r^2(p^2 - p_r^2)$. Разделив обе части уравнения на r^2 , получаем искомое тождество (9), справедливое всюду, кроме, быть может, точки $r = 0$.

Далее, разделив обе части тождества (9) на $2m$, находим выражение для кинетической энергии, а затем и выражение гамильтониана в сферических координатах

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + V(r). \quad (11)$$

Подобно энергии классической частицы гамильтониан есть сумма трех членов: «радиальной кинетической энергии» $p_r^2/2m$, «вращательной кинетической энергии» $l^2/2mr^2$ (заметьте, что mr^2 есть момент инерции относительно начала координат) и потенциальной энергии $V(r)$.

Непосредственное вычисление с заменой переменных, упомянутое в начале параграфа, приводит к тому же выражению, причем оператор l^2 представляется в виде

$$l^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (12)$$

В заключение выпишем уравнение Шредингера в сферических координатах:

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \quad (13)$$

Разумеется, решения этого уравнения могут рассматриваться как решения уравнения Шредингера только после изучения их поведения в начале координат. Не следует забывать, что справедливость выражения (11) в начале координат не является автоматически обеспеченной, независимо от вида функции, на которую действует гамильтониан H . Не приводя доказательства, ограничимся здесь указанием того, что уравнение (13) эквивалентно уравнению Шредингера во всем пространстве, включая начало координат, если только ψ удовлетворяет условию (7), т. е. условию эрмитовости оператора p_r .

§ 3. Отделение угловых переменных. Сферические функции

Из выражений (11) и (12) видно, что операторы H и l^2 коммутируют. Это можно было предвидеть: поскольку H коммутирует с l_x , l_y , l_z , он коммутирует и с любой функцией от этих операторов и, в частности, с l^2 . Наблюдаемые H и l^2 имеют (по крайней мере одну) общую базисную систему. Поэтому решение проблемы собственных значений H следует проводить в два этапа: решить проблему собственных значений l^2 , а затем

искать собственные функции оператора l^2 , удовлетворяющие уравнению Шредингера. Конкретная форма потенциала $V(r)$ будет играть роль только на втором этапе вычислений.

При нахождении полной системы собственных функций оператора l^2 переменная r является параметром и может быть временно опущена, так как оператор l^2 действует только на угловые переменные θ и φ .

Оператор l^2 коммутирует с каждой компонентой момента импульса (см. уравнение (V.70)), в частности, он коммутирует с l_z . В теории специальных функций показывается, что общими собственными функциями операторов l^2 и l_z , определенных выражениями (12) и (3), являются *сферические функции* $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Основные свойства этих функций даны в Дополнении Б (§ 10). Их построение будет подробно обсуждаться при систематическом изучении момента импульса в квантовой механике (гл. XIII). Различные сферические функции отмечаются индексами l и m , причем l может принимать все целые положительные значения и нуль, а m — все целые значения от $-l$ до $+l$. Имеем:

$$l^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (14)$$

$$l_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m \hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (15)$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots, \infty; m = -l, -l+1, \dots, +l).$$

В пространстве квадратично интегрируемых функций от θ и φ , т. е. в пространстве квадратично интегрируемых функций, определенных на сфере радиуса 1, сферические функции образуют полную ортонормированную систему. Следует учитывать, что скалярное произведение определяется в этом случае как интеграл по сфере единичного радиуса³⁾, причем элемент поверхности выражается формулой

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$

Соотношения ортонормированности записываются в виде

$$\int Y_l^m Y_{l'}^{m'} d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (16)$$

Каждой паре квантовых чисел (l, m) соответствует одна сферическая функция. Требуя, чтобы функция $\psi(r, \theta, \varphi)$ была общей собственной функцией операторов l^2 и l_z , принадлежащей собственным значениям $l(l+1)\hbar^2$ и $m\hbar$ соответственно, мы определяем ее угловую зависимость: функция $\psi(r, \theta, \varphi)$ имеет форму $f(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$.

³⁾ См. обсуждение в конце § VII.13. Аналогичные соображения следует иметь в виду при написании соотношения замкнутости в представлении (θ, φ) (уравнение (Б.88)).

§ 4. Радиальное уравнение

Перейдем теперь ко второму этапу решения уравнения Шредингера. Мы должны найти общие собственные функции коммутирующих операторов H , l^2 и l_z . Они являются решениями уравнения Шредингера вида:

$$\psi_l^m(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_l(r). \quad (17)$$

Из того, что ψ_l^m есть решение уравнения (13), а Y_l^m — собственная функция l^2 (уравнение (14)) следует, что $\chi_l(r)$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right] \chi_l(r) = 0, \quad (18)$$

где $p_r^2 \equiv -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r$.

Удобно ввести обозначение

$$y_l(r) = r \chi_l(r) \quad (19)$$

и заменить уравнение (18) эквивалентным радиальным уравнением

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right] y_l(r) = 0, \quad (20)$$

которое имеет большое сходство с одномерным уравнением Шредингера. Отметим, что норма ψ_l^m , после проведения интегрирования по углам, определяется выражением

$$\langle \psi_l^m, \psi_l^m \rangle = \int_0^\infty r^2 |\chi_l(r)|^2 dr = \int_0^\infty |y_l(r)|^2 dr \quad (21)$$

и что условие (7) эрмитовости p_r эквивалентно условию

$$y_l(0) = 0. \quad (22)$$

Нас будут интересовать не все возможные решения радиального уравнения (20), так как для того, чтобы функция ψ_l^m была приемлема в качестве собственной функции необходимо, чтобы y_l удовлетворяла некоторым условиям регулярности. Нужно: а) исследуя поведение y_l в начале координат, убедиться в том, что ψ_l^m действительно является решением уравнения Шредингера во всем пространстве, включая начало координат; б) потребовать, чтобы решение было нормируемым (в смысле, определенном на стр. 185).

В целях уточнения условий регулярности рассмотрим подробнее поведение решений уравнения (20) вблизи начала координат. Будем предполагать, что потенциал $V(r)$ ограничен во всем интервале, кроме, быть может, начала координат, где допустима сингулярность типа $1/r$. Эти предположения выполняются во всех практически интересных случаях. При таких условиях уравнение (20) допускает одно «регулярное» решение R_l (определенное с точностью до постоянного множителя), которое в начале координат обращается в нуль как r^{l+1} ; другое решение вблизи начала координат ведет себя как $(1/r)^l$).

Для доказательства предположим, что функция $V(r)$ является аналитической в окрестности начала координат, и будем искать частное решение уравнения (20) в виде ряда $r^s(1 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots)$. Подставляя это разложение в уравнение, разлагая функцию $V(r)$ в ряд Тейлора и приравнявая нулю коэффициенты при равных степенях r в левой части уравнения, получим бесконечную последовательность алгебраических уравнений, из которых первое

$$s(s-1) - l(l+1) = 0$$

определяет s , а последующие — коэффициенты $a_1, a_2, \dots$. В нашем случае уравнение для s имеет два решения: $l+1$ и $-l$. Если $s = l+1$, вычисление коэффициентов ряда может быть продолжено до бесконечности и мы получаем «регулярное» решение R_l . Если же $s = -l$, то вычисление коэффициентов невозможно. Однако, нетрудно показать, что если R_l является решением уравнения (20), то функция

$$R_l(r) \int \frac{dr'}{R_l^2(r')},$$

которая вблизи начала координат ведет себя как $(1/r)^l$, также является решением уравнения. Общее решение есть линейная комбинация этих двух частных решений.

Всякое решение типа $(1/r)^l$ должно быть отброшено, так как оно не удовлетворяет по крайней мере одному из условий а) и б). Действительно, если $l \neq 0$, интеграл от квадрата модуля такого решения расходится в нуле и согласно уравнению (21) функция ψ_l^m , образованная из такого решения, не принадлежит пространству Гильберта (условие б)). Заметим, что расходимость в нуле имеет место и для собственного дифференциала функции ψ_l^m . Поэтому данное решение должно быть отброшено

⁴⁾ Это естественно, так как общее решение уравнения (20) в окрестности нуля приближенно может быть представлено решением уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v(r) = 0,$$

а общее решение последнего уравнения есть $v(r) = ar^{l+1} + \frac{b}{r^l}$ (a и b — произвольные постоянные).

как в случае дискретного спектра E , так и в случае непрерывного спектра.

Это рассуждение неприменимо при $l = 0$. Но в этом случае соответствующая волновая функция ψ_0 не удовлетворяет уравнению Шредингера (условие (а)). Действительно, вблизи начала координат эта функция ведет себя как $1/r$ и, поскольку $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$ (см. уравнение (А. 12)), имеем

$$(H - E)\psi_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\delta(r).$$

Таким образом, мы должны сохранить только «регулярные» решения или, что то же самое, решения, удовлетворяющие условию (22). При этом функция ψ_l^m является решением уравнения Шредингера всюду, включая начало (условие а)). Далее, поскольку интеграл нормировки сходится в начале координат, выполнение условия принадлежности ψ_l^m или ее собственного дифференциала пространству Гильберта (условие б)) будет зависеть исключительно от поведения этого решения на бесконечности.

Дополненное условием (22) радиальное уравнение (20) представляет собой уравнение Шредингера, описывающее одномерное движение частицы с массой m при наличии потенциала $V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}$ в области $(0, \infty)$ и бесконечно большого отталкивающего потенциала в области $(-\infty, 0)$. Решение уравнения Шредингера в трех измерениях свелось, таким образом, к одномерному уравнению Шредингера. Все свойства такого уравнения, разобранные в гл. III (свойства вронскиана, асимптотическое поведение решений, соотношения ортогональности и т. д.), остаются справедливыми и в нашем случае, несмотря на сингулярность «эквивалентного потенциала» типа $l(l+1)/r^2$ в начале координат.

§ 5. Собственные решения радиального уравнения. Структура спектра.

Природа спектра энергии и собственных функции радиального уравнения (20) при заданном значении l зависит от асимптотического поведения решений уравнения, регулярных в начале координат. Все выводы § III.10 могут быть повторены здесь без изменения.

Предположим, например, что при $r \rightarrow \infty$ потенциал $V(r)$ стремится к нулю быстрее $1/r$:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0.$$

Энергетический спектр состоит из двух частей:

а) если $E < 0$, то будучи регулярным в начале решение бесконечно растет по абсолютной величине как $e^{\kappa r}$, где $\hbar\kappa = \sqrt{-2mE}$, кроме некоторых дискретных значений $E_l^{(1)}$, $E_l^{(2)}$, ..., для которых

$$y_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\kappa r}.$$

Эти значения и являются единственно возможными собственными значениями. Каждому из них соответствует радиальная функция с ограниченной нормой;

б) если $E > 0$, то регулярное в начале координат решение бесконечно осциллирует согласно закону

$$y_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right) \quad \left(k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right).$$

Оно приемлемо в качестве собственного решения при любых значениях $E > 0$ и представляет состояние непрерывного спектра. Постоянная δ_l называется *сдвигом фазы* или просто *фазой* (дополнительный член $-l\pi/2$ добавлен для того, чтобы при $V(r) = 0$ выполнялось равенство $\delta_l = 0$; см. § 7). Фаза δ_l является важной величиной: она характеризует асимптотическое поведение регулярного решения в случае непрерывного спектра и играет существенную роль в задачах о рассеянии (гл. X).

Если потенциал V при $r \rightarrow \infty$ стремится к нулю как $1/r$ или еще медленнее (но монотонным образом), то асимптотическое поведение решений не столь просто, однако основной результат, касающийся природы спектра, остается в силе: это всюду невырожденный спектр, включающий непрерывную область для положительных энергий и последовательность (бесконечную счетную) отрицательных дискретных уровней энергии.

Остается показать, что при заданном значении l множество построенных нами собственных функций $y_l(r)$ образует полную систему в том смысле, что любая квадратично интегрируемая функция от r , определенная на полуоси $(0, \infty)$, может быть разложена в ряд по этим собственным функциям. Мы примем, что это так для всех рассматриваемых в дальнейшем потенциалов; в противном случае гамильтониан H не являлся бы наблюдаемой.

§ 6. Заключение

Подводя итоги, констатируем, что наблюдаемые H , l^2 и l_z составляют полный набор коммутирующих наблюдаемых. Задача построения общих собственных функций H , l^2 и l_z сводится к разделению в уравнении Шредингера угловых переменных и

радиальной переменной. Если фиксировать собственные значения $l(l+1)\hbar^2$ и $m\hbar$ операторов l^2 и l_z соответственно, то собственные функции имеют вид

$$\psi_l^m = y_l(r) \frac{Y_l^m(\theta, \varphi)}{r}, \quad (23)$$

где $y_l(r)$ есть решение радиального уравнения (20), которое обращается в нуль в начале координат и остается ограниченным во всем пространстве.

Часто говорят, что такая собственная функция представляет состояние с моментом импульса l или, точнее, что частица обладает моментом импульса l с компонентой m относительно оси z . Напомним, что l и m целые числа и что $l \geq 0$, $-l \leq m \leq l$. Согласно традиционной спектроскопической терминологии l называется *азимутальным квантовым числом*, а m — *магнитным квантовым числом*. По традиции более низкие состояния момента импульса отмечаются буквами алфавита, а не численными значениями азимутального квантового числа: значения $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ соответствуют буквы $s, p, d, f, g, h, \dots$

Природа спектра H зависит от поведения потенциала $V(r)$ на бесконечности. В частности, если $V(r)$ стремится (монотонно) к нулю, энергетический спектр содержит некоторое число отрицательных дискретных значений и множество (континуальное) положительных значений.

Каждое из собственных значений *непрерывного спектра бесконечно вырождено*. Действительно, для любых возможных значений (lm) момента импульса существует собственная функция с положительной энергией E .

Уровни энергии *дискретного спектра* E_{kl} могут быть отмечены двумя индексами, азимутальным квантовым числом l и радиальным квантовым числом k , позволяющим различать собственные значения радиального уравнения при заданном l . *A priori* нет никаких причин, по которым радиальные уравнения, соответствующие различным значениям квантового числа l , могли бы иметь одинаковые собственные значения: в общем случае собственные значения E_{kl} все различны, но каждое $(2l+1)$ раз вырождено, так как каждому соответствует столько линейно независимых собственных функций, сколько при данном l имеется возможных значений магнитного квантового числа m , т. е. $-l, -l+1, \dots, +l$.

Для некоторых частных форм потенциала $V(r)$ может случиться, что некоторые из собственных значений E_{kl} совпадают; в этом случае вырождение увеличивается. Мы встретимся с вырождением этого рода при изучении атома водорода (гл. XI) и трехмерного изотропного гармонического осциллятора (гл. XII).

Раздел II. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЙ ПРЯМОУГОЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ. СВОБОДНАЯ ЧАСТИЦА

§ 7. Сферические функции Бесселя

Если в интервале $(0, \infty)$ существуют области, где потенциал $V(r)$ имеет постоянное значение

$$V(r) = V_0 = \text{const},$$

то в этих областях радиальное уравнение принимает особенно простую форму и его общее решение является линейной комбинацией хорошо известных функций, а именно сферических функций Бесселя.

Предположим, что $E > V_0$. Если положить

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \quad \rho = kr, \quad (24)$$

то уравнение (20) принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] y_l = 0.$$

Тогда радиальная функция $f_l = y_l/r$, рассматриваемая как функция от ρ , является решением «сферического уравнения Бесселя»

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] f_l = 0. \quad (25)$$

Общее решение уравнения (25) есть линейная комбинация двух частных решений. Наиболее часто применяемые частные решения приведены в Дополнении Б (§ 6); это функции j_l , $n_l^{(5)}$, $h_l^{(+)}$, $h_l^{(-)}$. Из них только j_l является регулярной в начале координат (ведет себя как ρ^l); три остальные имеют в начале координат полюс порядка $l+1$. Функции j_l и n_l являются вещественными и на бесконечности ведут себя как стоячие волны:

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(\rho - l/2\pi)}{\rho}, \quad n_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\cos(\rho - l/2\pi)}{\rho}. \quad (26)$$

Функции $h_l^{(+)} \equiv n_l + i j_l$ и $h_l^{(-)} \equiv n_l - i j_l$ асимптотически ведут себя как расходящаяся и сходящаяся волны соответственно:

$$h_l^{(+)} \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{i(\rho - l/2\pi)}}{\rho}, \quad h_l^{(-)} \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-i(\rho - l/2\pi)}}{\rho}. \quad (27)$$

В случае $E < V_0$ полагаем

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (28)$$

⁵⁾ Большинство авторов под n_l понимают функцию с противоположным знаком.

и все сказанное выше остается справедливым, если только заменить всюду k на ix . В частности, асимптотические формулы (26) и (27) остаются в силе. Единственной радиальной функцией, ограниченной на бесконечности, является функция $h_l^{(+)}(ixr)$; она экспоненциально стремится к нулю. Точнее, функция $i^l h_l^{(+)}(ixr)$ является вещественной, равной произведению e^{-xr}/xr на полином степени l от $1/xr$, так что асимптотически

$$i^l h_l^{(+)}(ixr) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-xr}}{xr}. \quad (29)$$

§ 8. Свободная частица. Свободные плоские и сферические волны

Вышеприведенные результаты применимы и к случаю свободной частицы. В этом случае $V(r) = 0$ во всем интервале $(0, \infty)$, и гамильтониан сводится к члену кинетической энергии

$$H = \frac{p^2}{2m}.$$

Будем искать общие собственные решения H , l^2 и l_z . Решение с моментом импульса (lm) и энергией E имеет вид $Y_l^m(\theta, \varphi) f_l(r)$, где f_l есть решение уравнения (25), ограниченное во всем интервале $(0, \infty)$.

Если $E < 0$, то единственное решение, ограниченное на бесконечности, а именно $h_l^{(+)}(ixr)$, в начале координат имеет полюс порядка $l+1$. Задача на собственные значения не имеет решения; как и следовало ожидать, не существует собственных состояний с отрицательной энергией.

Если $E > 0$, то уравнение (25) имеет одно и только одно всюду ограниченное решение, а именно функцию $j_l(kr)$. Таким образом, существует одно собственное решение с моментом импульса (lm) для каждого положительного значения $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ энергии — это функция

$$Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr). \quad (30)$$

Каждое такое собственное решение отмечается двумя дискретными индексами l, m и непрерывным индексом k , который может принимать все значения в интервале $(0, \infty)$; множество полученных сферических волн образует полную ортонормированную систему (см. задачу 3).

Совокупность плоских волн e^{ikr} составляет другую полную ортонормированную систему собственных функций энергии свободной частицы. Это общие собственные функции наблюдаемых p_x, p_y, p_z , т. е. решения, соответствующие определенному

заданному значению импульса p . Каждая плоская волна определяется тремя непрерывно изменяющимися параметрами — тремя компонентами вектора $\mathbf{k}$, которые могут принимать все значения от $-\infty$ до $+\infty$.

Волна $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ представляет свободную частицу с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. В то же время она не представляет состояния с определенным моментом импульса, подобно тому как сферическая волна (30) не представляет состояния с определенным импульсом. Это не удивительно, так как три компоненты импульса p_x, p_y, p_z не коммутируют одновременно с l^2 и l_z .

§ 9. Разложение плоской волны по сферическим функциям

Каждое собственное значение энергии свободной частицы бесконечно вырождено. Поскольку сферические волны (30) образуют полную систему, счетное множество сферических волн, соответствующее заданному волновому числу, k растягивает пространство собственных функций с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Следовательно, плоская волна $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ может быть разложена в ряд по этим функциям:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}(\mathbf{k}) Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr). \quad (31)$$

Если выбрать ось z в направлении $\mathbf{k}$, то плоская волна может быть записана в форме $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta}$; она не зависит от φ и разложение (31) содержит только члены с $m = 0$ ⁶⁾. Положим

$$\rho = kr, \quad u = \cos \theta.$$

Разложение плоской волны сводится к разложению в ряд по полиномам Лежандра (см. уравнение (Б.94)):

$$e^{i\rho u} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho) P_l(u). \quad (32)$$

Для определения коэффициентов c_l , можно действовать следующим образом. Дифференцируя почленно ряд (32) по ρ , находим

$$iue^{i\rho u} = \sum_l c_l \frac{dj_l}{d\rho} P_l. \quad (33)$$

⁶⁾ Действительно,

$$l_z \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta) = 0.$$

Но это же разложение может быть записано и в другом виде, если учесть рекуррентные соотношения для полиномов Лежандра (Б. 78):

$$\begin{aligned} iue^{i\varphi u} &= i \sum_l c_l j_l u P_l = \\ &= i \sum_l \left(\frac{l+1}{2l+3} c_{l+1} j_{l+1} + \frac{l}{2l-1} c_{l-1} j_{l-1} \right) P_l. \end{aligned} \quad (34)$$

Приравнивая коэффициенты при P_l в разложениях (33) и (34) и используя рекуррентные соотношения (Б. 53—54) для сферических функций Бесселя, получаем соотношения:

$$\begin{aligned} l \left(\frac{1}{2l+1} c_l - \frac{i}{2l-1} c_{l-1} \right) j_{l-1}(\rho) = \\ = (l+1) \left(\frac{1}{2l+1} c_l + \frac{i}{2l+3} c_{l+1} \right) j_{l+1}(\rho). \end{aligned}$$

Чтобы они выполнялись при любом ρ необходимо и достаточно, чтобы выражения в скобках равнялись нулю, т. е. чтобы

$$\frac{1}{2l+3} c_{l+1} = \frac{i}{2l+1} c_l \quad (l=0, 1, 2, \dots, \infty),$$

откуда

$$c_l = (2l+1) i^l \cdot c_0.$$

Коэффициент c_0 можно найти, записывая разложение для случая $\rho=0$; тогда поскольку $j_l(0) = \delta_l$, получим $c_0 = 1$.

В заключение выпишем формулу разложения плоской волны:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (35)$$

Для того чтобы получить это разложение в произвольной системе сферических координат, заметим, что угол θ , фигурирующий в разложении (35), есть угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{r}$. Обозначим символами $\hat{\mathbf{k}}$ и $\hat{\mathbf{r}}$ угловые координаты этих векторов. Согласно теореме сложения сферических функций (Б. 98)

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}).$$

Подставляя это выражение в разложение (35), имеем

$$e^{ikr} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}). \quad (36)$$

§ 10. Сферическая прямоугольная яма

В качестве иллюстрации решения задачи о частице в центрально-симметричном поле сил, рассмотрим «прямоугольную яму» (рис. 28):

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a, \\ 0 & r > a. \end{cases} \quad (37)$$

Решение радиального уравнения совершенно аналогично случаю одномерной прямоугольной ямы. Мы умеем писать общее решение уравнения Шредингера в каждой из областей $(0, a)$ и (a, ∞) ; это линейная комбинация сферических функций Бесселя. Условия регулярности в начале и на бесконечности и условие непрерывности функции и ее логарифмической производной в точке $r = a$ позволяют определить допустимые решения.

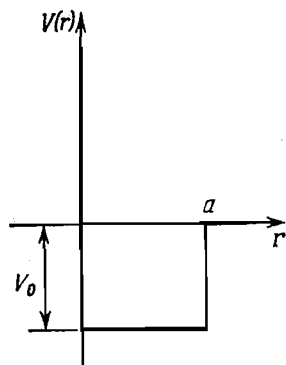


Рис. 28. Сферическая прямоугольная потенциальная яма.

Пусть E — энергия частицы. Положим $K = [2m(E + V_0)]^{1/2}/\hbar$. Во внутренней области $(0 < r < a)$ радиальное уравнение имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left(K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] f_l(r) = 0.$$

Положив $\rho = Kr$, приходим к уравнению (25). Существует только одно решение, регулярное в начале: $A j_l(Kr)$ (A — постоянная нормировки).

Во внешней области $(r > a)$ уравнение Шредингера есть уравнение для свободной частицы. Следует рассмотреть два случая:

А) $E < 0$. Дискретный спектр, связанные состояния.

Положим $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$. Единственным решением, ограниченным на бесконечности, является функция $B h_l^{(+)}(i\kappa r)$, характерная для связанного состояния. Условие непрерывности функции при $r = a$ фиксирует отношение B/A . Непрерывность логарифмической производной дает

$$\frac{1}{h_l^{(+)}(i\kappa r)} \left(\frac{d}{dr} h_l^{(+)}(i\kappa r) \right) \Big|_{r=a} = \frac{1}{j_l(Kr)} \frac{d}{dr} j_l(Kr) \Big|_{r=a}. \quad (38)$$

Это условие может быть выполнено только для некоторых дискретных значений E . Оно определяет уровни энергии связанных состояний частицы в яме. Если речь идет об s -состояниях

($l = 0$), то уравнение имеет простой вид

$$-ka = Ka \operatorname{ctg} Ka. \quad (38a)$$

Это уравнение подобно уравнению (III. 18) одномерной задачи из § III. 6. Обсуждение вопроса о числе корней уравнения и числе узлов решений может быть повторено здесь без больших изменений. Аналогичные выводы можно сделать относительно значений момента импульса (задача 5).

Б) $E > 0$. *Непрерывный спектр, несвязанные состояния.*

Положим $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Общее решение уравнения Шредингера во внешней области всюду ограничено. Это линейная комбинация функций $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$. Условия непрерывности в точке $r = a$ фиксируют коэффициенты линейной комбинации. Каждому значению E соответствует одна и только одна волновая функция (с точностью до постоянного множителя).

Если внешнее решение представить в форме

$$B [\cos \delta_l \cdot j_l(kr) + \sin \delta_l \cdot n_l(kr)], \quad (39)$$

то условие непрерывности функции в точке $r = a$ определяет отношение B/A . Величина δ_l находится из условия непрерывности логарифмической производной

$$\frac{Kj'_l(Ka)}{j_l(Ka)} = k \frac{\cos \delta_l \cdot j'_l(ka) + \sin \delta_l \cdot n'_l(ka)}{\cos \delta_l \cdot j_l(ka) + \sin \delta_l \cdot n_l(ka)}, \quad (40)$$

δ_l — действительная величина и может быть названа сдвигом фазы сферической волны с моментом импульса l . Пользуясь выражениями (26), нетрудно проверить, что асимптотический вид решения (39) выражается формулой

$$B \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}.$$

В случае s -волны уравнение (40) принимает простую форму:

$$K \operatorname{ctg} Ka = k \operatorname{ctg}(ka + \delta_0). \quad (40a)$$

Раздел III. ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ. ОТДЕЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЦЕНТРА МАСС

§ 11. Отделение движения центра масс в классической механике

При изучении системы двух частиц в квантовой механике мы, вообще говоря, имеем дело с задачей в 6 измерениях. Однако если частицы не испытывают никаких других воздействий кроме их взаимодействия, зависящего только от вектора относительного положения частиц $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, то задача распадается

на две трехмерные задачи: задачу о свободной частице и задачу о частице в статическом потенциальном поле. Пусть m_1 , m_2 — массы, $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$ — импульсы, $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ — векторы положения этих двух частиц. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H \equiv \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (41)$$

Метод решения задачи состоит в отделении движения центра масс от относительного движения — в полной аналогии с соответствующим методом классической механики.

Напомним вкратце, как выглядит классическое рассмотрение задачи. Положим:

$$\begin{aligned} M &= m_1 + m_2, & \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, & \mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \\ m &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, & \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, & \mathbf{p} &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (II)$$

При замене динамических переменных, согласно этим формулам, движение пары частиц представляется как движение двух фиктивных частиц. Одна из них есть *центр масс*, положение которого дается вектором $\mathbf{R}$, импульс $\mathbf{P}$ равен полному импульсу системы, а масса M равна полной массе системы. Другая частица, сопоставляется относительному движению; ее положение $\mathbf{r}$ есть относительное положение первой частицы по отношению ко второй, скорость $\mathbf{p}/m$ равна относительной скорости $\mathbf{p}_1/m_1 - \mathbf{p}_2/m_2$, масса m этой *относительной частицы* называется *приведенной массой*.

Отметим несколько замечательных свойств преобразования (II):

$$m_1 m_2 = m M, \quad (42a)$$

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{P^2}{2M}, \quad (42б)$$

$$m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = m r^2 + M R^2, \quad (42в)$$

$$\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2 = \mathbf{p} \mathbf{r} + \mathbf{P} \mathbf{R}, \quad (42г)$$

$$\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{l} + \mathbf{L}. \quad (42д)$$

В уравнении (42д) мы ввели моменты импульса двух частиц $\mathbf{l}_1$ и $\mathbf{l}_2$, момент импульса относительной частицы $\mathbf{l} = [\mathbf{r} \mathbf{p}]$ и центра масс $\mathbf{L} = [\mathbf{R} \mathbf{P}]$.

Нетрудно видеть, что преобразование сохраняет скобки Пуассона; это — каноническое преобразование. Поэтому уравнения движения в новых переменных являются каноническими урав-

нениями, полученными, исходя из функции Гамильтона, выраженной в новых переменных, т. е.

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (43)$$

Находим

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{P}}{M}, \quad \dot{\mathbf{P}} = 0, \quad \dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\text{grad } V.$$

Уравнения движения центра масс и относительной частицы полностью разделились. Движение центра масс является равномерным и прямолинейным — это движение свободной частицы с массой M . Движение относительной частицы есть движение частицы с массой m в поле действия потенциала $V(\mathbf{r})$.

§ 12. Отделение движения центра масс квантовой системы двух частиц

Чтобы рассмотреть ту же задачу в квантовой механике, мы вводим новые динамические переменные $\mathbf{r}$, $\mathbf{R}$, $\mathbf{p}$ и $\mathbf{P}$, определенные уравнениями (II). Гамильтониан, в старых переменных выражавшийся формулой (41), теперь принимает форму (43). Соотношения коммутации таковы, как если бы мы имели две частицы в точках $\mathbf{r}$ и $\mathbf{R}$ с импульсами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{P}$; единственно отличными от нуля коммутаторами являются

$$[r_j, p_j] = i\hbar, \quad [R_j, P_j] = i\hbar \quad (j = x, y, z).$$

Все эти свойства чисто алгебраические и без труда проверяются с помощью уравнений (II).

Аналогично проверяется и выполнение уравнений (42) в квантовой механике, включая уравнение (42д), причем нет необходимости изменять порядок фигурирующих в этих формулах операторов.

В новых динамических переменных гамильтониан может быть представлен как сумма двух членов: $H = H_R + H_r$, из которых первый,

$$H_R = \frac{\mathbf{P}^2}{2M},$$

зависит только от переменных центра масс, а второй,

$$H_r = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

только от переменных относительного движения. Векторы, образованные путем тензорного умножения собственных векторов наблюдаемой H_r на собственные векторы наблюдаемой H_R , образуют полную систему собственных векторов наблюдаемой H .

Таким образом, уравнение Шредингера в представлении $\{\mathbf{R}, \mathbf{r}\}$ записывается в виде

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}) \right) \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (44)$$

где Δ_R и Δ_r обозначают операторы Лапласа по координатам $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$ соответственно⁷⁾. Это уравнение обладает полной системой собственных решений $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r})$, причем функции Φ и φ удовлетворяют соответственно уравнениям:

$$H_R \Phi(\mathbf{R}) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \right) \Phi(\mathbf{R}) = E_R \Phi(\mathbf{R}),$$

$$H_r \varphi(\mathbf{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E_r \varphi(\mathbf{r}).$$

Собственная энергия полной системы равна сумме собственных энергий «отделенных» систем: $E = E_R + E_r$.

Если в начальный момент времени t_0 волновая функция является произведением вида $F(\mathbf{R})f(\mathbf{r})$, то это свойство факторизации сохраняется с течением времени; функция $F(\mathbf{R})$ эволюционирует как волновой пакет, представляющий свободную частицу с массой M , а функция $f(\mathbf{r})$ — как волна, представляющая частицу с массой m в поле действия потенциала $V(\mathbf{r})$ ⁸⁾.

На практике рассмотрение задачи двух тел, таким образом, сводится к исследованию движения частицы в поле потенциала $V(\mathbf{r})$, т. е. к задаче, которую мы уже умеем решать в случае, когда этот потенциал является центрально-симметричным.

§ 13. Система многих частиц

Отделение движения центра масс может быть осуществлено и в системах с несколькими частицами всякий раз, когда потенциал взаимодействия V зависит только от взаимного положения частиц и не зависит от их абсолютного положения; иными словами, *когда взаимодействие инвариантно относительно обшей трансляции всех частиц*.

Рассмотрим квантовую систему из $N + 1$ частицы, гамильтониан которой обладает указанным свойством инвариантности. Мы всегда можем выполнить операцию редукции к центру масс на любой паре частиц, т. е. заменить их динамические переменные на переменные их центра масс и «относительной частицы». Этот процесс может быть продолжен; после первой редукции на двух частицах можно выполнить редукцию на центре масс этих двух частиц и некоторой третьей частицы. После этих двух последовательных замен динамических переменных три частицы заменяются «относительной частицей» частиц 1 и 2, «частицей», связанной с относительным движением центра масс

⁷⁾ Это уравнение можно было бы получить непосредственно, исходя из уравнения Шредингера в представлении $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$ и производя в этом уравнении с частными производными замену переменных $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{R})$.

⁸⁾ Если $m_1 \ll m_2$, то $m \simeq m_1$ и $M \simeq m_2$ (пример: атом водорода, m_1 — масса электрона, m_2 — масса протона); если $m_1 \simeq m_2$, то $m \simeq m_1/2$ и $M \simeq 2m_1$ (пример: ядро дейтерия, m_1 — масса протона, m_2 — масса нейтрона).

двух первых частиц 1 и 2 и третьей частицы и, наконец, центром масс трех частиц. В общем случае с помощью N замен переменных можно заменить $N+1$ частицу на N «относительных частиц» и центр масс совокупности из $N+1$ частицы. Эта редукция к центру масс совокупности может быть проведена многими способами: либо от частицы к частице ($(N+1)/2$ возможных вариантов), либо разделяя систему из $N+1$ частицы на две группы из N_1 и N_2 частиц, производя редукцию к центру масс в каждой из этих групп, а затем заменяя их центры масс R_1 и R_2 на «относительную частицу» $R_1 - R_2$ и центр масс всей системы $(M_1 R_1 + M_2 R_2)/(M_1 + M_2)$, либо разделяя первоначальную систему из $N+1$ частицы на три группы и т. д.

Пусть r_i , p_i и m_i — соответственно, положение, импульс и масса i -й частицы, а R , P и M — соответствующие величины, относящиеся к центру масс системы из $N+1$ частицы:

$$M = \sum_{i=1}^{N+1} m_i, \quad P = \sum_{i=1}^{N+1} p_i, \quad R = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N+1} m_i r_i$$

и пусть ρ_j , ω_j и μ_j ($j = 1, 2, \dots, N$) соответствующие величины, принадлежащие j -й «относительной частице», появляющейся в процессе редукции к центру масс, описанном выше. Поскольку такая редукция есть последовательность N редукций к центру масс двух частиц, равенства (42) без труда обобщаются и дают:

$$m_1 m_2 \dots m_{N+1} = M \mu_1 \mu_2 \dots \mu_N, \quad (45a)$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} \frac{p_i^2}{2m_i} = \frac{P^2}{2M} + \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j^2}{2\mu_j}, \quad (45б)$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} m_i r_i^2 = M R^2 + \sum_{j=1}^N \mu_j \rho_j^2, \quad (45в)$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} p_i r_i = P R + \sum_{j=1}^N [\omega_j \rho_j], \quad (45г)$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} [r_i p_i] = [R P] + \sum_{j=1}^N [\rho_j \omega_j]. \quad (45д)$$

С другой стороны и по той же причине, новые динамические переменные подчиняются соотношениям коммутации, характерным для динамических переменных квантовой системы из $N+1$ частицы. Наконец, ясно, что потенциал V зависит только от относительных координат $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N$ и что полная кинетическая энергия является суммой кинетической энергии центра масс $P^2/2M$ и кинетических энергий «относительных частиц» согласно (45б), т. е.

$$H = \frac{P^2}{2M} + \left[\sum_{j=1}^N \frac{\omega_j^2}{2\mu_j} + V(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N) \right].$$

Таким образом, движение центра масс отделяется и решение задачи $N+1$ тела сводится к задаче N тел.

Все эти результаты не зависят от конкретной процедуры редукции к центру масс. В частности, каким бы ни был выбор N «относительных частиц», произведение их приведенных масс $\mu_1 \mu_2 \dots \mu_N$, сумма их кинетических энергий $\sum_j \omega_j^2/2\mu_j$ и сумма их моментов импульса $\sum_j [\rho_j \omega_j]$ останутся неизменными: уравнения (45а), (45б) и (45д) (задача 7).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Показать, что определяемый уравнением (6) эрмитов оператор радиального импульса p_r удовлетворяет уравнению

$$p_r = \frac{1}{2} \left(\frac{r}{r} p + p \cdot \frac{r}{r} \right).$$

2. Рассматривается частица, движущаяся в центрально-симметричном потенциале $V(r)$ и обладающая некоторым числом связанных состояний. Показать, что основным состоянием является состояние s . Показать также, что если существует связанное состояние с моментом импульса L , то существует связанное состояние, принадлежащее каждому из значений l момента импульса, где $l < L$, и что если обозначить с помощью E_l наиболее низкий уровень энергии, принадлежащий l , то $E_0 < E_1 < \dots < E_L$.

3. Выписывая явно соотношения ортогональности и замкнутости, показать, что собственные функции свободной частицы

$$k \sqrt{\frac{2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr),$$

зависящие от непрерывного индекса $k (0 < k < \infty)$ и целых индексов l и $m (l \geq 0, -l \leq m \leq l)$, образуют полную ортогональную систему.

Для этого следует доказать соотношение

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{1}{2} \frac{\pi}{k^2} \delta(k - k'),$$

принимая во внимание, что функция $\delta(r - r') = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z')$ в сферических координатах имеет вид

$$\delta(r - r') = (r^2 \sin \theta)^{-1} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi').$$

Показать, что если (k, θ_k, φ_k) — сферические координаты вектора $\mathbf{k}$, то

$$\int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(k'r) d\mathbf{r} = \frac{2\pi^2}{k^2} (-i)^l Y_l^m(\theta_k, \varphi_k) \delta(k - k').$$

4. Вычислить коммутаторы каждой из составляющих $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ с компонентой u_l момента импульса $\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ вдоль направления единичного вектора $\mathbf{u}$. Показать, что они могут быть записаны в общем виде:

$$[(u_l), \mathbf{p}] = \frac{\hbar}{i} [\mathbf{u}\mathbf{p}], \quad [(u_l), \mathbf{r}] = \frac{\hbar}{i} [\mathbf{u}\mathbf{r}].$$

Вывести отсюда, что всякая компонента l коммутирует со скалярными величинами p^2, r^2 и $\mathbf{r}\mathbf{p}$.

5. Какому условию должны удовлетворять характеристические параметры прямоугольной потенциальной ямы V_0 и a из § 10, чтобы: а) не существовало ни одного связанного s -состояния; б) существовало заданное число связанных s -состояний? Имеется ли связь между числом связанных s -состояний и числом узлов радиальной функции, соответствующей нулевой энергии? Те же вопросы для случая произвольного l .

6. Радиальное уравнение для частицы в поле центрально-симметричного потенциала $V(r)$ рассматривается методом ВКБ. Чтобы применение метода было оправданным, требуется не только, чтобы потенциал $V(r)$ мало изменялся на расстояниях порядка длины волны, но и чтобы $l \gg 1$. Опыт показывает — и этому можно дать некоторое теоретическое обоснование (см. *Langer, loc. cit.* в сноске VI.9) —, что метод дает хорошие результаты и при малых значениях l , если заменить $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ в выражении $l(l+1)/r^2$ (так называемый центробежный барьер) радиального уравнения. Показать, что после этой модификации метод ВКБ при любых l правильно дает:

а) асимптотическую форму $\sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right)/r$ свободной сферической волны ($V(r) = 0$);

б) спектр атома водорода ($V(r) = -e^2/r$);

в) спектр изотропного гармонического осциллятора $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ (строгие решения задач на собственные значения б) и в) содержатся, соответственно, в гл. XI и XII).

7. В системе из $N+1$ частицы осуществляется отделение движения центра масс двумя различными путями. Векторы положения $\rho'_1, \dots, \rho'_N$ «относительных частиц», полученные вторым путем, связаны с векторами положения $\rho_1, \dots, \rho_N$, полученными первым путем, линейным соотношением

$$\rho'_j = \sum_{k=1}^N A_{jk} \rho_k.$$

Пусть $\mu_1, \dots, \mu_N$ и $\mu'_1, \dots, \mu'_N$ — приведенные массы этих «относительных частиц». Показать, что матрица $(N \times N)$ с элементами

$$U_{jk} = \mu_j'^{1/2} A_{jk} \mu_k^{-1/2}$$

является ортогональной.

8. Рассматривается двумерное уравнение Шредингера в случае, когда потенциальная энергия $V(r)$ зависит только от радиальной переменной ($x = r \cos \vartheta$, $y = r \sin \vartheta$). Доказать тождество

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}.$$

Из этого результата вывести, что существует полная система собственных функций вида

$$\psi(r, \vartheta) = f(r) e^{il\vartheta},$$

причем радиальная часть является решением уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] f(r) = 0,$$

обращающимся в нуль в начале координат.

Замечание. Если $V = 0$, то этим регулярным решением является функция Бесселя $J_{|l|}(kr)$, где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

§ 1. Введение

Эта глава посвящена элементарным понятиям теории столкновений. Результаты опытов по столкновению частиц выражаются при помощи так называемых эффективных сечений, непосредственно связанных с асимптотическим поведением стационарных решений уравнения Шредингера. Поэтому, определив понятие эффективного сечения, мы посвятим большую часть раздела I выяснению этой связи на простом примере рассеяния частицы на потенциале, который достаточно быстро стремится к нулю на бесконечности (быстрее $1/r$); далее будет показано, каким образом, с помощью метода отделения движения центра масс, применить полученные результаты к случаю столкновения двух взаимодействующих частиц.

Все остальное содержание главы относится к рассеянию частицы на центральном потенциале и методу решения этой задачи, известному как метод фазовых сдвигов. Этот метод излагается в разделе II. Он особенно удобен, если потенциал имеет конечный радиус действия, ибо в этом случае особенно четко проявляются замечательные свойства фазовых сдвигов, что будет разобрано в разделе III. Особо следует отметить резонансные явления, проявляющиеся при столкновениях квантовых частиц — аналогичные явления имеют место в любой задаче о распространении волн. Обсуждению и физическому истолкованию резонансных явлений посвящен раздел IV. Наконец, в последнем разделе V будут приведены некоторые полезные выражения для фазовых сдвигов и выведены две приближенные формулы: формула Борна и формула Бете, или формула эффективного радиуса действия.

Раздел I. ЭФФЕКТИВНЫЕ СЕЧЕНИЯ И АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ

§ 2. Определение эффективных сечений

Рассмотрим типичный эксперимент по рассеянию, когда монокинетический пучок частиц бомбардирует заданную мишень. Пусть J — величина первоначального потока, т. е. число

частиц пучка, пересекающих в единицу времени единицу площади поверхности, перпендикулярной направлению пучка и неподвижной относительно мишени. Если P — число частиц в единице объема падающего пучка, а v — скорость частиц пучка по отношению к мишени, то

$$J = Pv.$$

В обычных условиях опыта P столь мало, что можно пренебречь взаимодействием частиц в первоначальном пучке и считать, что столкновения отдельных частиц с мишенью происходят независимо друг от друга. Счетчики измеряют число $\mathcal{N}$ частиц, рассеиваемых в единицу времени в телесном угле $d\Omega$ в направлении $\Omega = (\theta, \varphi)$. Это число прямо пропорционально потоку частиц

$$\mathcal{N} = J\Sigma(\Omega) d\Omega.$$

Величина $\Sigma(\Omega)$, имеющая размерность площади, является параметром, характеризующим столкновение частицы, обладающей скоростью v , с мишенью: это эффективное сечение рассеяния частицы мишенью в направлении Ω .

В большинстве случаев мишень состоит из большого числа N атомных или ядерных рассеивателей, причем расстояния между этими атомами или ядрами атомов достаточно велики по сравнению с длиной волны падающих частиц, так что можно пренебречь всеми явлениями интерференции между волнами, рассеянными различными центрами¹⁾; каждый центр рассеяния действует независимо от других. Если, кроме того, мишень выбирается достаточно тонкой, чтобы можно было пренебречь многократным рассеянием, то $\mathcal{N}$ оказывается прямо пропорциональным N

$$\mathcal{N} = JN\sigma(\Omega) d\Omega.$$

Площадь $\sigma(\Omega)$ называется эффективным сечением рассеяния частицы на рассеивающем центре в направлении Ω или, короче, *дифференциальным эффективным сечением рассеяния*.

Полное число частиц, рассеиваемых в единицу времени, получается интегрированием по углам. Оно равно $JN\sigma_{\text{полн}}$, где

$$\sigma_{\text{полн}} = \int \sigma(\Omega) d\Omega$$

— *полное эффективное сечение рассеяния*.

В ядерной физике центры рассеяния имеют линейные размеры порядка $10^{-12} - 10^{-13}$ см, эффективные сечения обычно

¹⁾ Эта ситуация реализуется не всегда. Например, при различных дифракционных явлениях в кристаллах — дифракции электронов, тепловых нейтронов или рентгеновских лучей — важнейшую роль играет именно указанная выше интерференция.

измеряются в барнах или миллибарнах:

$$1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2, \quad 1 \text{ миллибарн (мб)} = 10^{-27} \text{ см}^2.$$

Во всех этих рассуждениях мы молчаливо предполагали, что рассеяние происходит в результате упругих столкновений, т. е. столкновений, при которых квантовое состояние рассеивателя не изменяется и не происходит передачи энергии внутренним степеням свободы рассеивателя. Пока мы ограничимся только упругим рассеянием. Кроме того, мы не будем рассматривать рассеивающий центр (атом или ядро атома) во всей его сложности, а будем описывать его статическим потенциалом, зависящим от радиуса-вектора $\mathbf{r}$ частицы.

§ 3. Стационарная волна рассеяния

Исследуем задачу о рассеянии частицы с массой m на потенциале $V(\mathbf{r})$, причем в этой главе ограничимся только такими потенциалами, которые при $r \rightarrow \infty$ стремятся к нулю быстрее $1/r$. Рассеяние на кулоновском потенциале будет рассмотрено в гл. XI.

Пусть E — энергия, а $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ — начальный импульс частицы. Эффективное сечение $\sigma(\Omega)$ можно связать с таким решением уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

которое на бесконечности имеет асимптотическую форму

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1)$$

Примем без обсуждения²⁾, что для каждого значения $\mathbf{k}$ имеется одно и только одно решение этого типа. Будем называть это решение $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ *стационарной волной рассеяния* с волновым вектором $\mathbf{k}$.

Физический смысл обоих членов асимптотической формы решения легко понять, если обратиться к определению (IV.9) вектора плотности потока³⁾

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{r}) (\nabla \psi(\mathbf{r}) - (\nabla \psi(\mathbf{r}))^* \psi(\mathbf{r})].$$

²⁾ Это утверждение будет доказано в разделе II для случая, когда центрально-симметричный потенциал V обнаруживает достаточно регулярное поведение в начале координат.

³⁾ Можно определить эрмитов оператор $\mathbf{J}(\mathbf{r}_0)$, представляющий плотность потока в точке $\mathbf{r}_0$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{2m} [\rho \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \mathbf{p}];$$

тогда плотность потока, определенная выше, есть среднее значение этого оператора в некотором заданном квантовом состоянии.

Плоская волна e^{ikr} представляет волну с плотностью 1 и плотностью потока $\hbar k/m$. Член $f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$, если учитывать только члены наинизшего порядка по $1/r$, описывает волну с плотностью $|f(\Omega)|^2/r^2$ и плотностью потока, по направлению Ω в сторону *увеличивающихся* r (расходящаяся волна), равной $\frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2}$.

Ввиду того, что влияние потенциала V в асимптотической зоне пренебрежимо мало, можно, следуя классическому приближению (см. § VI.4), интерпретировать член e^{ikr} как пучок монокинетических частиц с импульсом $\hbar k$ и плотностью 1 (начальный пучок). Тогда член $f(\Omega) e^{ikr}/r$ интерпретируется как радиальный пучок частиц, исходящих из центра, т. е. представляет поток рассеянных частиц.

В согласии с этой интерпретацией найдем число частиц, рассеянных в единицу времени в телесный угол $d\Omega$ в направлении Ω : это поток частиц, проходящих через участок сферической поверхности очень большого радиуса, который виден из начала координат под телесным углом $(\Omega, \Omega + d\Omega)$, т. е. $\frac{\hbar k}{m} |f(\Omega)|^2 d\Omega$.

Разделив это число на величину первоначального потока $J = \hbar k/m$, получим эффективное сечение рассеяния

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2. \quad (2)$$

Функция $f(\Omega)$ называется *амплитудой рассеяния*.

§ 4. Описание рассеяния при помощи пучка волновых пакетов⁴⁾

Интуитивные рассуждения предыдущего параграфа некорректны по двум причинам.

Во-первых, вектор плотности потока не является простой суммой потоков от плоской волны и рассеянной волны. Необходимо учесть вклад интерференции между $\exp(ikr)$ и $f(\Omega) \exp(ikr)/r$. В предшествующих рассуждениях явление интерференции не учитывалось.

Во-вторых, представление физической ситуации стационарной волной рассеяния

$$\psi_k(r) e^{\frac{i}{\hbar} Et} \quad (3)$$

является идеализированным. На самом деле каждая частица, подвергающаяся рассеянию, должна представляться волновым пакетом, образованным суперпозицией стационарных волн типа (3), соответствующих волновым векторам, несколько отличающимся по величине и направлению от k . Этот пакет должен быть построен так, чтобы правильно учесть начальные условия задачи. Вследствие дисперсии по направлению импульса его поперечные размеры ог-

⁴⁾ Рассмотрение проблемы рассеяния в § 4, 5 и 6 основано на работах Чу и Лоу по теории рассеяния. Вычисления § 16 также заимствованы из этих работ.

раничены и не превосходят размеров диафрагмы источника первоначального пучка. Вследствие же дисперсии по энергии пакет ограничен также и в продольном направлении и распространяется прямолинейно в направлении мишени со скоростью, равной групповой скорости $v = \hbar k/m$.

Удобно характеризовать траекторию частицы положением $\mathbf{b}$ точки ее пересечения с плоскостью (S), проходящей через рассеивающий центр перпендикулярно направлению распространения. Пусть t_0 — момент времени пересечения плоскости (S) центром пакета в том случае, когда его движение не возмущается рассеивающим потенциалом; тогда закон движения центра пакета до столкновения может быть записан в форме

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \mathbf{b} + \mathbf{v} (t - t_0).$$

Начальный поток является в действительности потоком волновых пакетов указанного выше типа, перемещающихся параллельно друг другу со скоростью $\mathbf{v}$ и отличающихся друг от друга только значениями параметров $\mathbf{b}$ и t_0 , фиксирующих движение центров пакетов до столкновения.

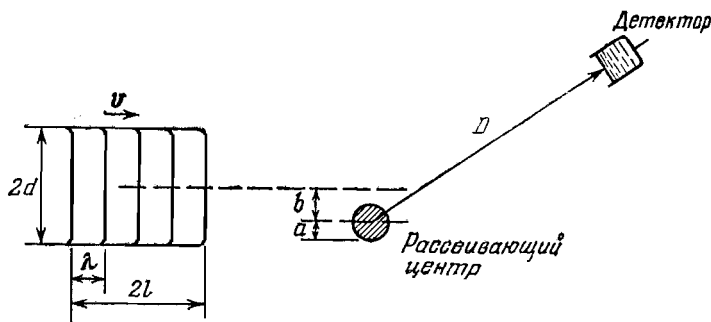


Рис. 29. Схема эксперимента по рассеянию и характеристические длины в этом опыте.

В дальнейшем обсуждении будут рассматриваться следующие характеристические длины (рис. 29):

$\lambda = \hbar/mv$ — средняя длина волны падающего волнового пакета;

d, l — поперечные и продольные размеры падающего пакета;

a — размеры зоны рассеяния;

D — расстояние регистрирующего прибора от зоны рассеяния.

Длины d и l связаны соотношениями неопределенности с дисперсиями падающего пакета волн соответственно по направлению и энергии. Поскольку мы предполагаем, что направление распространения пакета и его энергия хорошо определены, необходимо

$$\lambda \ll d \text{ и } \lambda \ll l. \quad (4)$$

Чтобы само рассеяние не зависело существенным образом от конкретной формы волнового пакета, необходимо, кроме того, чтобы его размеры значительно превосходили размеры зоны рассеяния, т. е. той области пространства, где потенциал имеет отличную от нуля величину, т. е.

$$a \ll d, l \quad (5)$$

($a \simeq 10^{-8}$ см при рассеянии на атоме и $a \simeq 10^{-13}$ см при рассеянии на ядре).

При этих предположениях, если прицельный параметр превосходит поперечные размеры пакета ($b > d$), то падающий волновой пакет не касается

зоны рассеяния и движется все время как свободный волновой пакет. Если, напротив, $b < d$, он достигает зоны рассеяния в некоторый момент $t_1 \approx t_0 - l/v$. В этот момент начинается собственно столкновение. Через достаточно большой промежуток времени волновой пакет вновь оказывается полностью вне зоны рассеяния, но теперь он состоит, вообще говоря, из двух частей: прошедшего волнового пакета, форма и закон движения которого мало отличаются от первоначальных, и пакета волн, рассеянных в разных направлениях относительно первоначального (рис. 30⁵).

Детектирование рассеянных частиц осуществляется некоторым регистрирующим устройством (счетчики, фотопластинки и т. д.) в заданном направлении $\Omega = (\theta, \varphi)$ на некотором расстоянии порядка D от центра рассеяния. Это расстояние не должно быть слишком большим, если мы не хотим принимать во внимание расплывание волнового пакета в ходе эксперимента (см. § VI. 3):

$$\sqrt{\lambda D} \ll d, l. \quad (6)$$

Но это расстояние все же должно быть достаточно большим, чтобы распространение детектируемой волны не возмущалось присутствием потенциала зоны рассеяния, т. е.

$$a, \lambda \ll D, \quad (7)$$

и чтобы детектор не мог регистрировать частицы проходящего волнового пакета:

$$d \ll D \sin \theta. \quad (8)$$

Заметим, что волна, рассеянная вперед ($\theta = 0$), не может быть отделена от проходящей волны.

Объединяя условия (4) — (8), получаем неравенства⁶):

$$a, \sqrt{\lambda D} \ll l, \quad (9a)$$

$$a, \sqrt{\lambda D} \ll d \ll D. \quad (9б)$$

Формула (2) выражает эффективное сечение рассеяния только при том условии, что экспериментальное устройство, предназначенное для измерения этой величины, обеспечивает выполнение неравенств (9).

Кроме этого необходимо, чтобы волновые пакеты имели достаточно хорошо определенные направление движения и энергию, так как только в этом случае амплитуда рассеяния вообще имеет смысл. Функция $f(\Omega)$ должна оставаться практически постоянной и по модулю, и по фазе при изменении

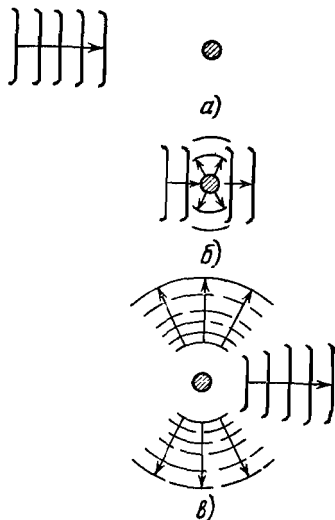


Рис. 30. Схема процесса рассеяния волнового пакета: а) — до столкновения; б) — в момент столкновения; в) — после столкновения (заштрихована область, где действует отличный от нуля потенциал).

⁵) Это явление аналогично явлениям отражения и прохождения волн в одномерной задаче, рассмотренной в гл. III (§§ 3, 6 и 7).

⁶) В экспериментах атомной и ядерной физики длина d равна самое большее ширине входной диафрагмы ($d \sim 1$ мм); длина l может быть заметно больше; D — обычно порядка 1 м. Если $a \approx 10^{-8}$ см и $\lambda \approx 10^{-8}$ см, что является максимальной величиной, то $\sqrt{\lambda D} \approx 10^{-3}$ см и $l/a \approx 10^7$, $l/\sqrt{\lambda D} \gg d/\sqrt{\lambda D} \approx 10^2$, $d/D \approx 10^{-3}$. Таким образом, условия (9) выполняются с избытком.

энергии на величину порядка $\delta E \simeq \hbar v/l$, а угла падения — на величину порядка λ/d вблизи соответствующих средних значений.

Доказательство этого результата будет проведено в двух последующих параграфах.

§ 5. Рассеяние волнового пакета на потенциале

В предполагаемых условиях ($l, d \gg a$) эволюция волновых пакетов падающего пучка практически не зависит от их конкретной формы. Будем считать, что все они имеют одинаковую форму, причем каждый характеризуется параметрами $\mathbf{b}$ и t_0 , которые определяют движение центра пакета. Примем t_0 за начало отсчета времени ($t_0 = 0$), что не ограничивает общности рассуждений. Для определения формы падающего пакета введем функцию $\chi(\rho)$ с единичной нормой

$$\int |\chi(\rho)|^2 d\rho = 1. \quad (10)$$

Пусть $A(\kappa)$ — фурье-образ этой функции, так что

$$\chi(\rho) = \int A(\kappa) e^{i\kappa\rho} d\kappa. \quad (11)$$

По предположению $\chi(\rho)$ — вещественная функция, принимающая существенно отличные от нуля значения, когда ρ находится вблизи точки $\rho = 0$ в области с продольными размерами $\sim l$ и поперечными размерами $\sim d$. Функция $A(\kappa)$ также вещественная и отлична от нуля в области с продольными размерами $\sim 1/l$ и поперечными размерами $\sim 1/d$ вблизи точки $\kappa = 0$. Для упрощения будем считать, что $d \simeq l$.

Задолго до столкновения ($t \ll -l/v$) исследуемый нами волновой пакет $\Psi_b(\mathbf{r}, t)$ тождествен волновому пакету для свободной частицы $\Phi_b(\mathbf{r}, t)$, центр которого движется по закону

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \mathbf{b} + \mathbf{v}t,$$

а форма в момент времени $t = 0$ выражается формулой

$$\Phi_b(\mathbf{r}, 0) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{b})} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{b}) = \int A(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{b})} d\mathbf{k}'.$$

В момент времени t :

$$\Phi_b(\mathbf{r}, t) = \int A(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{b}) - i \frac{E't}{\hbar}} d\mathbf{k}'. \quad (12)$$

Если пренебречь расплыванием, то свободный волновой пакет может быть представлен выражением (см. § XIII. 18)

$$\Phi_b(\mathbf{r}, t) \simeq e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}} e^{i \left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{Et}{\hbar} \right)} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{v}t - \mathbf{b}), \quad (13)$$

которое получается, если в (12) заменить энергию $E' = \hbar^2 k'^2/2m$ двумя первыми членами ее разложения по степеням $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$:

$$E' = E + \hbar \mathbf{v} \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{k}).$$

Волновой пакет Ψ_b получится, если вместо плоской волны в подынтегральном выражении формулы (12) мы подставим стационарную волну рассеяния:

$$\Psi_b(\mathbf{r}, t) \simeq \int A(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{b}} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{-i \frac{E't}{\hbar}} d\mathbf{k}'. \quad (14)$$

Это выражение является решением уравнения Шредингера, так как представляет собой суперпозицию решений этого уравнения. Нам достаточно показать, что до столкновения это выражение тождественно свободному волновому пакету Φ_b .

Поскольку функция $A(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ имеет острый максимум вблизи точки $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, вклад в интеграл дает только малая область около этой точки. Когда $t \ll -l/v$, фаза подынтегрального выражения ввиду присутствия экспоненциального фактора $\exp(iE't/\hbar)$ быстро изменяется именно в этой области, и интеграл практически равен нулю, кроме тех значений r , при которых фаза оказывается стационарной. Это может иметь место только для r порядка $v|t|$, иначе говоря для тех областей пространства конфигураций, где $\Psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ может быть заменена своей асимптотической формой

$$\Psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}'}(\Omega) \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{r}. \quad (15)$$

Подставляя это выражение в интеграл (14), находим

$$\Psi_b(\mathbf{r}, t) \underset{t \rightarrow -\infty}{\sim} \Phi_b(\mathbf{r}, t) + \Psi_b^{(d)}(\mathbf{r}, t), \quad (16)$$

где

$$\Psi_b^{(d)} = \int A(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{b}} f_{\mathbf{k}'}(\Omega) \frac{e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{r} - E't/\hbar)}}{r} d\mathbf{k}'; \quad (17)$$

при $t \rightarrow -\infty$ фаза подынтегрального выражения не может быть сделана стационарной в области $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ и интеграл $\Psi_b^{(d)}$ практически равен нулю, каким бы ни было r . Волновой пакет, таким образом, в этом пределе действительно совпадает со свободным волновым пакетом.

Исследуем теперь эволюцию волнового пакета в зоне детектирования ($r \geq D$). В этой области пространства подстановка асимптотической формы (15) несомненно оправдана, выражение (16) вновь обретает силу.

Мы предположим, что дисперсии по направлению и энергии столь малы, что $f_{\mathbf{k}'}(\Omega)$ остается практически постоянной в области с размерами $1/d \simeq 1/l$ около точки $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ и что в интеграле (17) модуль $f_{\mathbf{k}'}(\Omega)$ можно заменить его значением в точке $\mathbf{k}$, а фазу этой функции — двумя первыми членами разложения:

$$\begin{aligned} \arg f_{\mathbf{k}'}(\Omega) &\simeq \arg f_{\mathbf{k}}(\Omega) + (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathbf{s}(\Omega), \\ \mathbf{s}(\Omega) &= \text{grad}_{\mathbf{k}} [\arg f_{\mathbf{k}}(\Omega)] \quad (s \ll d, l). \end{aligned} \quad (18)$$

Фазы других сомножителей также заменим двумя первыми членами разложения вблизи $\mathbf{k}$:

$$\mathbf{k}' \simeq \mathbf{k} + \mathbf{u}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad E' \simeq E + \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (19)$$

($\mathbf{u} \equiv \mathbf{v}/v$ — единичный вектор в направлении начальной скорости). Тогда вычисление по методу стационарной фазы приводит нас к результату, аналогичному формуле (13) для случая Φ_b :

$$\Psi_b^{(d)} \simeq e^{-i\mathbf{k}\mathbf{b}} f_{\mathbf{k}}(\Omega) \frac{e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - Et/\hbar)}}{r} \chi[\mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) + \mathbf{s} - \mathbf{b}]. \quad (20)$$

Поведение функции $\Psi_b^{(d)}$ существенно зависит от величины прицельного параметра b .

Если $b > d$, то аргумент функции χ все время находится в области, где значение этой функции пренебрежимо мало: $\Psi_b^{(d)}$ все время остается практически равной нулю, волновой пакет движется как свободный.

Если $b < d$, т. е. если падающий волновой пакет попадает в зону эффективного действия потенциала, то функция χ существенно отлична от нуля в сферическом слое толщины l по обе стороны сферы $r = vt$. Функция $\Psi_b^{(d)}$, практически равная нулю до столкновения, после столкновения представляет собой пакет сферических волн, расходящихся из центра с радиальной скоростью v . При $t \simeq D/v$ волна $\Psi_b^{(d)}$ достигает зоны детектирования, к этому моменту она уже полностью отделена от проходящей волны Φ_b по всем направлениям, кроме направления вперед ($\theta < d/D$), где эти две волны оказываются сравнимыми по величине и могут интерферировать⁷⁾. Мы приходим к качественным результатам, изложенным в § 4.

§ 6. Вычисление эффективных сечений

До вычисления эффективных сечений следует уточнить, в чем состоит операция детектирования. Каковы бы ни были детали экспериментального устройства, оно обязательно включает некоторую диафрагму, расположенную на расстоянии D и в направлении Ω от мишени. Отверстие диафрагмы пропускает без искажения волну в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$, остальная часть излучения отсекается. Регистрирующее устройство за диафрагмой детектирует все частицы, проходящие через отверстие. Вероятность $P_b(\Omega)d\Omega$ регистрации частицы, движение которой перед детектированием описывалось волной $\Psi_b(r, t)$, равна полному потоку через отверстие диафрагмы за все время столкновения⁸⁾, или, что то же самое, вероятности нахождения рассеянной частицы в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ по окончании столкновения ($t = T \gg l/v$).

Ввиду того, что детектор достаточно удален в поперечном направлении и проходящая волна не может на него действовать (условие (8)), вычисление указанной выше вероятности должно производиться с помощью рассеянной волны $\Psi_b^{(d)}$. Пользуясь выражением (20), находим

$$P_b(\Omega) = \int_0^\infty |\Psi_b^{(d)}(r, T)|^2 r^2 dr = |f_b(\Omega)|^2 \int_0^\infty |\chi(u(r - vT) + s - b)|^2 dr. \quad (21)$$

Поскольку $vT \gg l$, можно сделать замену переменной

$$z = r - vT$$

и распространить предел интегрирования до $-\infty$, что дает

$$P_b(\Omega) = |f_b(\Omega)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(uz + s - b)|^2 dz.$$

Рассмотрим теперь пучок частиц с потоком, равным 1: в единицу времени на элемент поверхности $(b, b + db)$ падает db частиц и каждая из них имеет

⁷⁾ Этим интерференционным членом нельзя пренебречь, ибо он обеспечивает сохранение нормы (задача 1).

⁸⁾ Момент пересечения диафрагмы частицей равен в среднем $(D + us)/v$. Он не может быть указан с точностью, превышающей l/v , в согласии с соотношением неопределенности время-энергия; величина us/v может рассматриваться как запаздывание прохождения рассеянной волны. Однако наше экспериментальное устройство, очевидно, не может учесть такое запаздывание, так как $s \ll l$ (см. обсуждение запаздывания отражения в § III. 6). Наблюдение запаздывания этого рода предполагает значительную погрешность определения энергии (см. § 16).

вероятность $P_b(\Omega) d\Omega$ быть рассеянной в направлении $(\Omega, \Omega + d\Omega)$. Вероятность рассеяния в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ в единицу времени и на единицу потока получается интегрированием этого выражения по b :

$$\sigma(\Omega) = |f_k(\Omega)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int db |\chi(uz + s - b)|^2.$$

Область интегрирования по b представляет собой плоскость, перпендикулярную u . Заменой переменных $\mathbf{p} = u\mathbf{z} + \mathbf{s} - \mathbf{b}$ тройной интеграл сводится к интегралу нормировки функции χ (уравнение (10)). Тогда действительно получаем выражение (2):

$$\sigma(\Omega) = |f_k(\Omega)|^2.$$

§ 7. Столкновение двух частиц. Лабораторная система и система центра масс

Метод отделения движения центра масс позволяет рассмотреть задачу о столкновении двух частиц при наличии потенциала взаимодействия, зависящего только от взаимного положения частиц $V(\mathbf{r})$, путем сведения ее к задаче рассеяния одной частицы на потенциале. Как было показано в разделе III гл. IX (мы будем следовать обозначениям этого раздела), движение двух частиц состоит из двух раздельных движений — движения центра масс как свободной частицы и движения «относительной частицы» с массой $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ под действием потенциала $V(\mathbf{r})$.

В типичном эксперименте по рассеянию мишень, состоящая из частиц типа 2, бомбардируется монокинетическим пучком частиц типа 1 и производится подсчет частиц какого-либо типа, например, типа 1, испускаемых в заданном направлении $\Omega_1 = (\theta_1, \varphi_1)$. До столкновения частица 2 находилась в покое, частица 1 двигалась со скоростью v , так что скорость центра масс равна

$$\mathbf{V} = \frac{m_1}{M} \mathbf{v} \quad (M = m_1 + m_2).$$

Полная энергия системы является суммой энергий движения центра масс и относительного движения

$$E = E_R + E_r;$$

здесь

$$E = \frac{m_1 v^2}{2}, \quad E_R = \frac{M V^2}{2} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} E, \quad E_r = \frac{m v^2}{2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E.$$

Во время столкновения центр масс продолжает оставаться в состоянии равномерного и прямолинейного движения. Очевидно, что величина эффективного сечения рассеяния связана с асимптотическим поведением функций стационарных состояний энергии E_r , зависящих от относительных координат.

Чтобы установить эту связь, удобно изменить систему отсчета и рассматривать явление рассеяния в той системе координат, в которой покоится центр масс частиц. Обычно *лабораторной системой* называется система отсчета, в которой неподвижна частица-мишень до столкновения, а *системой центра масс* — та система, в которой покоится центр масс; первая система рассматривалась выше, вторая равномерно и прямолинейно движется относительно первой со скоростью V . Переход от одной системы к другой изменяет описание движения центра масс, движение «относительной частицы» остается неизменным.

Определение эффективного сечения, данное в § 2, не обязательно предполагает, что частица мишени первоначально покоится.

Отметим, что падающий поток, входящий в это определение, есть поток частиц *относительно* мишени; эта величина не зависит от выбранной системы отсчета. Можно определить эффективное сечение $\sigma(\Omega)$ в системе центра масс, подобно тому как определялось эффективное сечение $\sigma_1(\Omega)$ в лабораторной системе для того же процесса. Величина $\sigma(\Omega)$ равна числу частиц типа 1, испускаемых в единицу времени на единицу телесного угла в направлении Ω , когда частица типа 2 бомбардируется относительным потоком частиц типа 1, равным единице, причем все наблюдения производятся в системе центра масс и углы рассеяния также измеряются в этой системе отсчета.

Из этого определения следует, что

$$\sigma(\Omega) d\Omega = \sigma_1(\Omega_1) d\Omega_1, \quad (22)$$

где Ω_1 — направление движения рассеянной частицы 1 в лабораторной системе отсчета, если в системе центра масс она движется в направлении Ω . Отметим равенство полных эффективных сечений

$$\sigma_{\text{полн}} = \int \sigma(\Omega) d\Omega = \sigma_{1 \text{ полн}}.$$

Это, разумеется, было ясно *a priori*, ибо полное эффективное сечение дает полное число частиц, рассеянных на единицу падающего потока, а эта величина не зависит от системы отсчета.

Величина $\sigma(\Omega)$ по сравнению с $\sigma_1(\Omega_1)$ более непосредственно связана с трехмерной задачей о рассеянии «относительной частицы» потенциалом $V(r)$. Действительно, в системе центра масс направление движения частицы 1 совпадает с направлением движения «относительной частицы» (частица 2 движется в противоположном направлении). Поскольку, кроме того, падающий поток «относительной частицы» по отношению к силовому центру ($r=0$) равен падающему потоку в нашей задаче

о рассеянии, величина $\sigma(\Omega)$ есть эффективное сечение рассеяния «относительной частицы» в направлении Ω , т. е. дифференциальное эффективное сечение рассеяния в направлении Ω частицы с массой m и начальной скоростью v на потенциале $V(r)$.

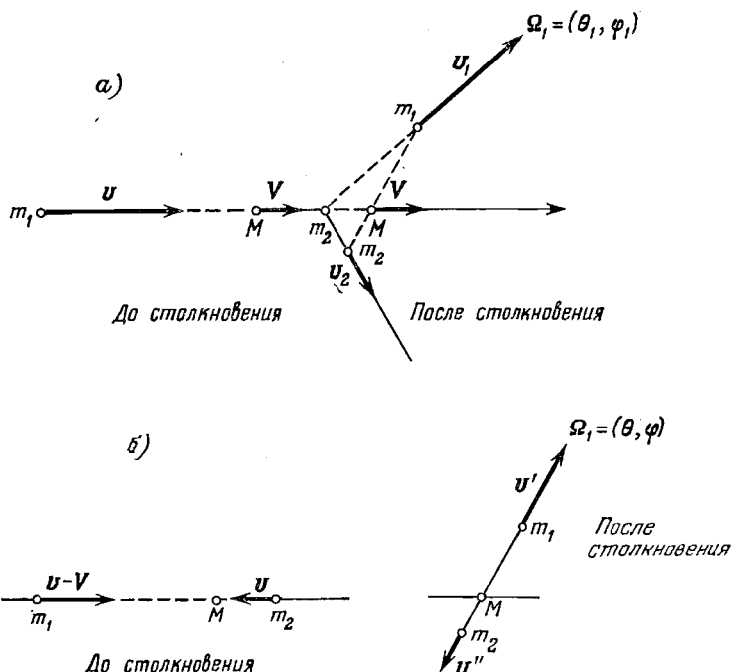


Рис. 31. а) Столкновение в лабораторной системе ($V = \frac{m_1}{M} v$); б) то же столкновение в системе центра масс.

В частности, если потенциал $V(r)$ асимптотически стремится к нулю быстрее, чем $1/r$, уравнение Шредингера для «относительной частицы»

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(r) = E_r \psi(r)$$

обладает собственным решением с энергией E_r , асимптотическая форма которого имеет вид

$$e^{ikr} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r},$$

где $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$, $k = mv / \hbar = m_2 k_1 / M$, k_1 — начальный волновой вектор в лабораторной системе координат. В этом случае

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2,$$

Чтобы перейти от этого выражения⁹⁾ к эффективному сечению $\sigma_1(\Omega_1)$ в лабораторной системе координат, необходимо найти связь между Ω и Ω_1 . В качестве полярной оси в обеих системах отсчета выберем ось, параллельную направлению движения. На рис. 31, а представлена схема столкновения в лабораторной системе, а на рис. 31, б — схема того же столкновения в системе центра масс. Начальные и конечные скорости двух частиц в сферических координатах представлены в следующей таблице.

	Начальные скорости		Конечные скорости	
	1	2	1	2
Лабораторная система	$\mathbf{v}(v, 0, 0)$	0	$\mathbf{v}_1(v_1, \theta_1, \varphi_1)$	$\mathbf{v}_2(v_2, \theta_2, \varphi_2)$
Система центра масс	$\mathbf{v}-\mathbf{V}(v-V, 0, 0)$	$-\mathbf{V}(V, \pi, 0)$	$\mathbf{v}'(v', \theta, \varphi)$	$\mathbf{v}''(v'', \pi-\theta, \varphi+\pi)$

$$\mathbf{V} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{V} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}'' = \mathbf{V} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}.$$

Направление (θ_1, φ_1) связано с направлением (θ, φ) векторным равенством¹⁰⁾

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}' + \mathbf{V}, \quad (23)$$

т. е.

$$\varphi_1 = \varphi, \quad v_1 \sin \theta_1 = v' \sin \theta, \quad v_1 \cos \theta_1 = v' \cos \theta + V,$$

откуда

$$\operatorname{tg} \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \tau}$$

⁹⁾ Все эти вычисления справедливы только в нерелятивистском приближении. Однако понятие системы центра масс сохраняет свою силу и в релятивистской механике: это система отсчета, в которой полный импульс (импульс частицы 1 + импульс частицы 2) равен нулю. Переход от системы центра масс к лабораторной системе осуществляется преобразованиями Лоренца. В нерелятивистском приближении преобразования Лоренца переходят в преобразования Галилея, т. е.

$$\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_i + \mathbf{V}t, \quad \mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_i + m_i \mathbf{V}.$$

¹⁰⁾ Связь между направлениями (θ_2, φ_2) и (θ, φ) определяется равенством $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}'' + \mathbf{V}$. Поскольку $\mathbf{v}'' = \mathbf{V}$, нетрудно показать, что $\theta_2 = \frac{1}{2}(\pi - \theta)$, $\varphi_2 = \varphi + \pi$.

ИЛИ

$$\cos \theta_1 = \frac{\cos \theta + \tau}{(1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2)^{1/2}}; \quad (24)$$

в этих выражениях мы положили

$$\tau = V/v' = m_1/m_2. \quad (25)$$

Векторную сумму (23) можно представить графически, тогда соотношение (24) легко получить из чертежа (рис. 32). Возможны два случая:

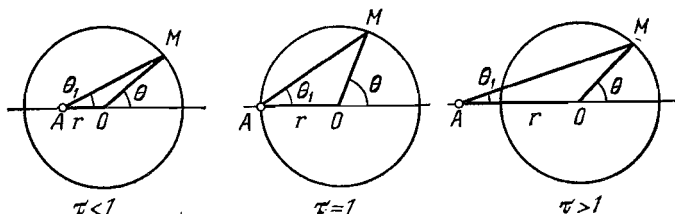


Рис. 32. Геометрическое построение θ_1 в зависимости от θ : $OA = \tau$, $OM = 1$ ($\tau = V/v' = m_1/m_2$).

а) $\tau < 1$ ($m_1 < m_2$). Угол θ_1 монотонно увеличивается от 0 до π , когда θ увеличивается от 0 до π . Заметим, что $\frac{1}{2}\theta < \theta_1 < \theta$ при любом θ . В пределе $m_1 \ll m_2$ имеем $\theta_1 \simeq \theta$ (центр масс практически совпадает с частицей 2, т. е. остается неподвижным в лабораторной системе).

б) $\tau > 1$ ($m_1 > m_2$). Когда θ увеличивается от 0 до π , θ_1 сначала увеличивается от 0 до некоторой максимальной величины, меньшей $\pi/2$ ($\theta_{1\max} = \arcsin \frac{1}{\tau}$), затем угол θ_1 уменьшается от $\theta_{1\max}$ до 0. Каждому значению θ_1 соответствуют, таким образом, два значения θ : $\theta_<$ и $\theta_>$, связанные между собой соотношением $\theta_1 = \frac{1}{2}(\theta_< + \theta_> - \pi)$; каждому из этих значений соответствуют два различных значения v_1 , причем меньшему значению угла соответствует большее значение v_1 .

Когда $\tau = 1$ ($m_1 = m_2$), имеем просто $\theta_1 = \theta/2$.

Из соотношения (24) получаем

$$\frac{d(\cos \theta_1)}{d(\cos \theta)} = \frac{1 + \tau \cos \theta}{(1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2)^{1/2}}$$

и поскольку

$$\frac{d\Omega_1}{d\Omega} = \left| \frac{d(\cos \theta_1)}{d(\cos \theta)} \right|,$$

находим, применяя соотношение (22):

$$\sigma_1(\Omega_1) = \sigma(\Omega) \frac{d\Omega}{d\Omega_1} = \frac{(1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2)^{1/2}}{|1 + \tau \cos \theta|} |f(\Omega)|^2. \quad (26)$$

Раздел II. РАССЕЯНИЕ ЦЕНТРАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ. ФАЗОВЫЕ СДВИГИ

§ 8. Разложение по парциальным волнам. Метод фазовых сдвигов

Рассмотрим рассеяние частицы *центрально-симметричным потенциалом* $V(r)$. Для вычисления эффективного сечения необходимо найти асимптотическую форму стационарной волны рассеяния ψ . С этой целью будем решать уравнение Шредингера в сферических координатах.

Направление начального волнового вектора $\mathbf{k}$ в данном случае является осью вращательной симметрии задачи. Если выбрать это направление в качестве полярной оси, то волна ψ и амплитуда рассеяния f не будут зависеть от угла φ . Разложим эти величины в ряды по полиномам Лежандра:

$$\psi(r, \theta) = \sum_l \frac{y_l(r)}{r} P_l(\cos \theta), \quad (27)$$

$$f(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta). \quad (28)$$

Введем следующие обозначения:

$$\varepsilon = k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r).$$

Тогда y_l есть регулярное решение радиального уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l = 0 \quad (29)$$

с асимптотическим поведением

$$y_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} a_l \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right). \quad (30)$$

Фазовые сдвиги δ_l определяются единственным образом по радиальному уравнению. Постоянная a_l должна быть выбрана так, чтобы функция $\psi(r, \theta)$ имела надлежащую асимптотическую форму. Пользуясь разложениями (IX.35) и (28), можно

выразить асимптотическую форму ψ в виде ряда по полиномам Лежандра:

$$e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l \left[(2l+1) i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta).$$

Если учесть также асимптотическое выражение для $j_l(kr)$, то можно переписать этот ряд, разделяя сходящиеся и расходящиеся волны, в форме

$$r\psi(r, \theta) \sim \sum_l \left[(-1)^{l+1} \frac{2l+1}{2ik} e^{-ikr} + \left(\frac{2l+1}{2ik} + f_l \right) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta).$$

В асимптотической области функция y_l должна быть равна выражению в квадратных скобках в правой части этой формулы. Это условие фиксирует a_l однозначно и позволяет выразить f_l как функцию фазовых сдвигов. Последовательно имеем

$$a_l = i^l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l}, f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l.$$

Подставляя последнее соотношение в (28), находим искомое выражение

$$f(\theta) = \lambda \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta), \quad (31)$$

здесь λ — начальная длина волны ($\lambda = 1/k$).

Полезно сравнить асимптотическую форму y_l/r , т. е. коэффициента разложения по полиномам Лежандра функции ψ , соответствующего моменту импульса l , с соответствующим коэффициентом разложения плоской волны e^{ikr} , а именно $(2l+1) i^l j_l(kr)$:

$$\frac{y_l}{r} \sim \frac{(2l+1)}{2ikr} \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr} \right),$$

$$(2l+1) i^l j_l(kr) \sim \frac{2l+1}{2ikr} \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right).$$

Обе эти функции, как видим, являются суперпозициями сходящейся и расходящейся волн равной интенсивности. Сходящиеся волны, очевидно, одинаковы для обеих функций. Однако член расходящейся волны в стационарном состоянии рассеяния отличается от соответствующего члена в плоской волне фазовым множителем $\exp(2i\delta_l)$: влияние рассеивающего потенциала сводится к сдвигу фазы каждой парциальной расходящейся волны.

Дифференциальное эффективное сечение рассеяния получается как квадрат модуля функции $f(\theta)$:

$$\sigma(\Omega) = \lambda^2 \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \times \\ \times \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta). \quad (32)$$

Интегрируя по углам (θ, φ) , получаем полное эффективное сечение. Учитывая соотношения ортогональности полиномов Лежандра, полное сечение можно выразить в виде ряда

$$\sigma_{\text{полн}} = 4\pi\lambda^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (33)$$

каждый член которого

$$\sigma_l = 4\pi(2l+1)\lambda^2 \sin^2 \delta_l \quad (34)$$

дает вклад в рассеяние парциальной волны с моментом импульса l . Отметим неравенство

$$\sigma_l \leq 4\pi(2l+1)\lambda^2. \quad (35)$$

Максимальное значение σ_l достигается при

$$\delta_l = (n + 1/2)\pi \quad (n - \text{целое число}).$$

§ 9. Квазиклассическое представление рассеяния. Прицельный параметр

Рассмотрим рассеяние *классической* частицы в поле центральной силы. Если энергия падающей частицы фиксирована $E = p^2/2m$, то каждая траектория характеризуется своим прицельным параметром b , определяемым как расстояние от силового центра C до прямой, положение которой определяется начальным импульсом p_0 (рис. 33). При таком столкновении момент импульса L является постоянной движения, причем b прямо пропорционален L

$$L = bp.$$

Рис 33. Рассеяние классической частицы на силовом центре C ; p_0 — начальный импульс, b — прицельный параметр.

Если поле сил имеет ограниченный радиус действия r_0 :

$V(r) = 0$ для $r > r_0$, то падающая частица испытывает отклонение траектории при $b < r_0$ и не испытывает его при $b > r_0$. Отклоняются частицы с достаточно малым моментом импульса.

Столкновение в квантовой теории имеет существенно иную природу: это в основе своей явление рассеяния волн. Однако

в тех случаях, когда рассеивающий потенциал оказывается пренебрежимо малым на расстояниях, превышающих некоторый радиус r_0 (причем не требуется точного обращения в нуль), квантовое рассеяние имеет много общего с явлением рассеяния пучка классических частиц потенциалом конечного радиуса действия r_0 . Как общее правило, вклад σ_l парциальной волны l пренебрежимо мал¹¹⁾, если $l\lambda \gg r_0$; если же $l\lambda \leq r_0$, то эта величина может принимать все значения от 0 до максимального

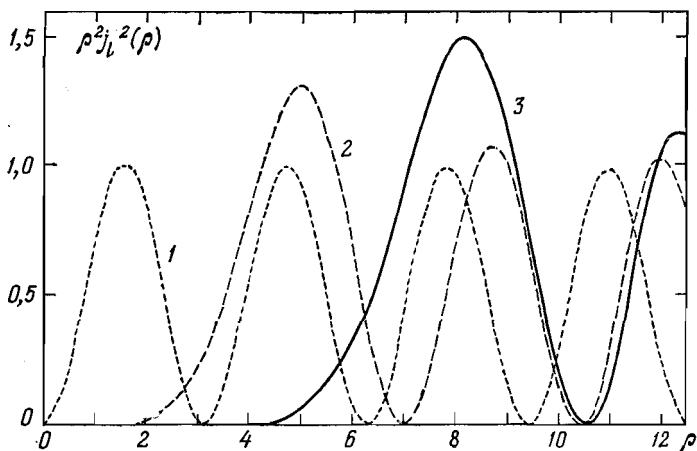


Рис. 34. График функции $\rho^2 j_l^2(\rho)$ для $l=0$ (кривая 1), 3 (кривая 2) и 6 (кривая 3).

значения $4\pi(2l+1)\lambda^2$. Согласно этому правилу существует некоторое сходство между вкладом волны l в рассеяние квантовой частицы и вкладом частиц с прицельным параметром между $l\lambda$ и $(l+1)l\lambda$, т. е. моментом импульса от $l\hbar$ до $(l+1)\hbar$, при рассеянии пучка классических частиц.

Это правило основано на следующем полуклассическом рассуждении. Падающая волна представляет собой суперпозицию сферических волн с заданным моментом импульса. Радиальная часть члена, соответствующего парциальной волне l , пропорциональна $j_l(r/\lambda)$, следовательно, относительная вероятность нахождения частицы в сферическом слое $(r, r+dr)$ равна $r^2 j_l^2(r/\lambda)$. Эта вероятность очень мала, пока $r < \sqrt{l(l+1)}\lambda$, и колеблется между 0 и 1, когда $r > \sqrt{l(l+1)}\lambda$ (см. рис. 34).

¹¹⁾ Это правило не является абсолютным; мы встретим исключения из него при рассмотрении резонансного рассеяния в § 14.

Если $r_0 < l\lambda$, то волна практически не проникает в область действия потенциала и поэтому не испытывает его влияния.

Это рассуждение не является строгим. Более точные результаты относительно сходимости рядов (31) и (32) будут приведены в § 12. Но как бы то ни было, метод фазовых сдвигов особенно удобен при вычислении эффективных сечений в случае, когда радиус действия потенциала не превосходит нескольких длин волн.

Раздел III. ПОТЕНЦИАЛ ОГРАНИЧЕННОГО РАДИУСА ДЕЙСТВИЯ

§ 10. Сдвиг фазы и логарифмическая производная

Предположим, что потенциал $V(r)$ отличен от нуля только в некоторой ограниченной области пространства: $V(r) = 0$ при $r > r_0$.

Пусть q_l — значение в точке r_0 логарифмической производной регулярного в начале координат решения радиального уравнения (29):

$$q_l = \frac{r}{y_l} \frac{dy_l}{dr} \Big|_{r=r_0} \quad (36)$$

(это определение отличается от обычного множителем r). Мы знаем, что q_l — *монотонно убывающая функция энергии* (§ III.8), детальный вид этой функции зависит, естественно, от формы потенциала $V(r)$.

Однако условие равенства нулю потенциала при $r > r_0$ позволяет установить соотношение между q_l и δ_l , которое не зависит от конкретной формы потенциала $V(r)$: задания q_l достаточно для определения асимптотического поведения решения.

В дальнейшем предполагаем, что нормировка y_l выбирается так, чтобы

$$y_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l). \quad (37)$$

Поэтому во внешней области

$$y_l = kr [\cos \delta_l j_l(kr) + \sin \delta_l n_l(kr)] \quad (r > r_0).$$

Для дальнейших выкладок удобно ввести обозначение $\xi = kr$ и ввести сходящиеся и расходящиеся волны

$$u_l^{(\pm)}(\xi) = \xi [n_l(\xi) \pm i j_l(\xi)] = \xi h_l^{(\pm)}(\xi),$$

вронскиан которых не зависит от ξ и равен

$$u^{(-)} \frac{d}{d\xi} u^{(+)} - u^{(+)} \frac{d}{d\xi} u^{(-)} = 2i. \quad (38)$$

Во внешней области

$$y_l = \frac{1}{2i} (u_l^{(+)} e^{i\delta_l} - u_l^{(-)} e^{-i\delta_l}) = \text{Im } u_l^{(+)} e^{i\delta_l} \quad (r > r_0). \quad (39)$$

Условие непрерывности логарифмической производной в точке $r = r_0$ дает соотношение

$$q_l = \xi \frac{\text{Im } e^{i\delta_l} \left(\frac{du_l^{(+)}}{d\xi} \right)}{\text{Im } e^{i\delta_l} u_l^{(+)}} \bigg|_{\xi=kr_0}. \quad (40)$$

Это и есть искомое соотношение между q_l и δ_l .

Чтобы представить данное соотношение в более удобной форме, введем обозначения:

$$\begin{aligned} |u_l^{(\pm)}(kr_0)| &= \frac{1}{\sqrt{v_l}}, \quad u_l^{(\pm)}(kr_0) = \frac{e^{\mp i\tau_l}}{\sqrt{v_l}}, \\ \frac{\xi}{u_l^{(\pm)}} \left(\frac{du_l^{(\pm)}}{d\xi} \right) \bigg|_{\xi=kr_0} &= q_l^{(\pm)}. \end{aligned} \quad (41)$$

Из уравнения (38) следует (см. задачу 3)

$$\text{Im } q_l^{(+)} = kr_0 v_l.$$

Здесь v_l — положительная величина, не превосходящая 1, она называется *фактором проникновения*.

В этих обозначениях условие непрерывности (40) записывается так:

$$e^{2i\delta_l} = e^{2i\tau_l} \frac{q_l - q_l^{(-)}}{q_l - q_l^{(+)}}$$

или же

$$\delta_l = \tau_l + \rho_l, \quad (42)$$

где

$$\rho_l = \arg(q_l - q_l^{(-)}) = \arctg \frac{kr_0 v_l}{q_l - \text{Re } q_l^{(+)}}. \quad (43)$$

Мы видим, что фазовый сдвиг δ_l выражается в виде суммы двух членов, из которых первый, τ_l , не зависит от конкретной формы рассеивающего потенциала, а второй, ρ_l , зависит от нее через q_l согласно уравнению (43).

Заметим, между прочим, что

$$y_l(r_0) = \frac{\sin \rho_l}{\sqrt{v_l}}. \quad (44)$$

§ 11. Сдвиги фаз при низких энергиях ($\lambda \rightarrow \infty$)

Зная поведение сферических функций Бесселя при малых значениях аргумента (уравнение (Б.52)), можно из уравнений (42) — (43) найти поведение δ_l , когда $kr_0 \ll l$, т. е. или при очень малых энергиях или при очень больших значениях момента импульса. Действительно, если $kr_0 \ll l$, то

$$\begin{aligned} \tau_l &\simeq \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \\ v_l &\simeq \frac{(kr_0)^{2l}}{[(2l-1)!!]^2}, \quad \text{Re } q_l^{(+)} \simeq -l + O(k^2 r_0^2) \end{aligned} \quad (45)$$

(эти выражения справедливы и при $l=0$, если $kr_0 \ll 1$).

Рассмотрим поведение эффективных сечений, когда энергия частицы стремится к нулю. При этом вещественная величина q_l увеличивается до некоторого предельного значения $\hat{q}_l$. В общем случае $\hat{q}_l \neq -l$, так что фазовый сдвиг δ_l стремится к нулю как k^{2l+1} . Находим

$$\delta_l \underset{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{l+1-\hat{q}_l}{l+\hat{q}_l} \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}. \quad (46)$$

Таким образом, амплитуда f_l , пропорциональная δ_l/k , стремится к нулю как k^{2l} . Следовательно, в пределе очень малых энергий эффективное сечение становится изотропным, так как все парциальные сечения σ_l стремятся к нулю как k^{4l} (уравнение (34)), кроме сечения s -волны σ_0 , которое стремится к некоторой постоянной, вообще говоря, отличной от нуля.

По определению *длиной рассеяния* называется величина

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} f_0 = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{k} = \left(1 - \frac{1}{\hat{q}_0}\right) r_0. \quad (47)$$

Длина рассеяния a получается при решении радиального уравнения, соответствующего нулевой энергии:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U(r) \right] y_0 = 0.$$

Это расстояние от начала координат до точки, в которой асимптота y_0 пересекает ось r . В пределе очень малых энергий

$$\sigma_{\text{полн}} = \sigma_0 = 4\pi a^2.$$

Если окажется, что $\hat{q}_l = -l$, то при стремлении энергии к нулю амплитуда f_l ведет себя как k^{2l-2} (кроме случая $l=0$, когда из $\hat{q}_0 = 0$ следует $f_0 \sim i/k$). Говорят, что имеется *резонанс* с нулевой энергией в состоянии l . Предшествующие выводы должны быть изменены следующим образом. Если это резонанс $s(l=0)$, то a бесконечно и $\sigma_{\text{полн}}$ стремится к бесконечности как $1/E$. Если

это резонанс $p(l=1)$, то $f(\theta)$ имеет вид $-a + b \cos \theta$, а эффективное сечение остается ограниченным, но не является изотропным. Если же резонанс имеет более высокий порядок, то он не влияет на общее поведение эффективных сечений в пределе малых энергий.

§ 12. Парциальные волны более высокого порядка. Сходимость ряда ($l \rightarrow \infty$)

Асимптотические формулы (45) позволяют также найти асимптотический вид фазовых сдвигов высокого порядка при заданном (ненулевом) значении энергии. Если l достаточно велико, выражение

$$k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}$$

остается отрицательным в интервале $(0, r_0)$; следовательно, решение y_l уравнения (29) в этом интервале ведет себя экспоненциально: величина q_l , очевидно, положительна. Кроме того, при $l \gg kr_0$ можно использовать выражения (45) и ввиду того что $q_l + l$ несомненно отлично от нуля, получаем следующее асимптотическое выражение, сходное с формулой (46):

$$\delta_l \underset{l \rightarrow \infty}{\sim} \frac{l+1-q_l}{l+q_l} \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}. \quad (48)$$

Выражение (48) определяет скорость сходимости разложения по парциальным волнам в случае, когда рассеивающий потенциал имеет ограниченный радиус действия. Это подтверждает оценки по порядку величины, сделанные в § 9.

§ 13. Рассеяние на твердой сфере

Если потенциал ограниченного радиуса действия соответствует потенциалу твердой сферы

$$V(r) = \begin{cases} +\infty, & \text{если } r < r_0, \\ 0, & \text{если } r > r_0, \end{cases}$$

то все формулы § 10 упрощаются. Волновая функция должна обращаться в нуль на поверхности сферы, т. е. $y_l(r_0) = 0$ при любых l ($q_l = -\infty$), что дает (уравнение (44)) $\rho_l = 0$, т. е.

$$\delta_l = \tau_l = \arg u_l^{(-)}. \quad (49)$$

После соответствующих вычислений получаем

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{j_l^2(kr_0)}{j_l^2(kr_0) + n_l^2(kr_0)} \quad (50)$$

и, в частности,

$$\sigma_0 = 4\pi r_0^2 \left(\frac{\sin kr_0}{kr_0} \right)^2.$$

При очень малых энергиях, в согласии с результатами § 11, дифференциальное эффективное сечение становится изотропным, и полное эффективное сечение имеет предел

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{\text{полн}} = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = 4\pi r_0^2, \quad (51)$$

соответствующий длине рассеяния $a = r_0$.

При возрастании энергии вклад парциальных волн высокого порядка становится все более значительным, а анизотропия рассеяния — все более выраженной. При очень больших энергиях ($\lambda \ll r_0$) дифференциальные и полные эффективные сечения могут быть вычислены при использовании асимптотического поведения функций Бесселя больших порядков. Таким путем получаем¹²⁾:

$$\sigma(\Omega) \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{r_0^2}{4} \left[1 + \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2} J_l^2(kr_0 \sin \theta) \right], \quad (52)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_{\text{полн}} = 2\pi r_0^2. \quad (53)$$

Дадим упрощенное доказательство соотношения (53). Зная функции $j_l(\xi)$ и $n_l(\xi)$, нетрудно установить поведение функции

$$g_l(\xi) = \frac{j_l^2(\xi)}{j_l^2(\xi) + n_l^2(\xi)}.$$

Эта функция ведет себя как $\xi^{4l+2}/(2l+1)!(2l-1)!!$ вблизи $\xi = 0$, затем монотонно растет до окрестности $\xi = l$, а затем бесконечно осциллирует по закону

$$g_l(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \sin^2 \left(\xi - \frac{l}{2} \pi \right). \quad (54)$$

Поэтому в сумме

$$\sigma_{\text{полн}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_l(kr_0)$$

¹²⁾ См. книгу Морса и Фешбаха, *loc. cit.*, сноска VI.⁹ $J_1(x)$ есть функция Бесселя первого порядка. При изменении x от 0 до $+\infty$ функция $J_1(x)$ сначала растет от нуля ($J_1(x) \sim x/2$), до первого максимума $J_1(1.84) \simeq 0.58$, затем уменьшается и первый раз обращается в нуль при $x \simeq 3.83$; далее функция бесконечно осциллирует, согласно формуле

$$J_1(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \left(\frac{2}{\pi x} \right)^{1/2} \cos \left(x - \frac{3\pi}{4} \right).$$

вклад членов $l > kr_0$ пренебрежимо мал по сравнению со вкладом членов $l < kr_0$, который можно грубо оценить, используя асимптотическую форму (54), что дает

$$\sigma_{\text{полн}} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{kr} (2l+1) \sin^2 \left(kr_0 - \frac{l}{2} \pi \right).$$

Эту сумму можно оценить, группируя попарно последовательные члены, что в пределе очень больших k дает

$$\int_0^{kr_0} l \, dl = \frac{k^2 r_0^2}{2},$$

откуда и получается выражение (53).

Таким образом, в пределе малых длин волн ($kr_0 \gg 1$) мы не получаем эффективного сечения рассеяния классической частицы твердой сферой радиуса r_0 . Полное классическое эффективное сечение

$$\sigma_{\text{кл}} = \pi r_0^2$$

равно только половине квантового результата в пределе малых длин волн. Аналогичным образом, дифференциальное классическое эффективное сечение изотропно и равно $r_0^2/4$: оно соответствует первому члену асимптотической формы (52) для $\sigma(\Omega)$.

Эти результаты показывают, что в рассматриваемом случае нельзя пренебречь волновым аспектом явления, так как даже в предельной ситуации очень малых длин волн потенциал нельзя считать медленно меняющимся в пространстве ввиду наличия разрыва в точке $r = r_0$. Наблюдаемое явление совершенно аналогично явлению дифракции в оптике, на что указывает исследование асимптотической формы (52) дифференциального эффективного сечения. Это выражение содержит два члена. Первый член изотропного «отражения» идентичен классическому дифференциальному эффективному сечению. Второй,

$$\frac{1}{4} r_0^2 \text{ctg}^2 \frac{\theta}{2} J_1^2(kr_0 \sin \theta),$$

является резко анизотропным: он дает существенный вклад только при малых углах порядка λ/r_0 ; это член «дифракции» (тенивое рассеяние), связанный с наличием тени от идеально отражающей сферы на пути падающей волны.

Раздел IV. РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ

§ 14. Рассеяние глубокой прямоугольной потенциальной ямы

В качестве другого примера потенциала конечного радиуса действия рассмотрим прямоугольную потенциальную яму из § IX.10. Положим

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad V_0 = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m}, \quad K^2 = K_0^2 + k^2$$

и выясним поведение различных парциальных волн в зависимости от энергии в случае очень глубокой ямы. Точнее говоря, предположим, что

$$Kr_0 \gg l, \quad (55)$$

$$K \gg k. \quad (56)$$

В этом случае величину q_l в правой части уравнения (43) в хорошем приближении можно выразить в виде

$$q_l \simeq Kr_0 \operatorname{ctg}(Kr_0 - l\pi/2). \quad (57)$$

Нетрудно проанализировать общее поведение $\delta_l(E)$ при малых энергиях (т. е., согласно (56), при $E \ll V_0$). По формулам (42) и (43) δ_l зависит от энергии посредством величин τ_l , $kr_0 v_l$, $\operatorname{Re} q_l^{(+)}$ и q_l . Первые три величины являются монотонными функциями kr_0 (τ_l убывает, две другие функции растут), причем поведение их вблизи нуля определяется формулами (45), а в асимптотической области ($kr_0 \gg l$) выражениями

$$\begin{aligned} \tau_l &\underset{kr_0 \rightarrow \infty}{\sim} - \left(kr_0 - \frac{l}{2} \pi \right), \\ \lim_{kr_0 \rightarrow \infty} v_l &= 1, \quad \lim_{kr_0 \rightarrow \infty} \operatorname{Re} q_l^{(+)} = 0. \end{aligned} \quad (58)$$

В интересующей нас области энергий эти три функции изменяются относительно медленно. Напротив, логарифмическая производная q_l , как это видно из формулы (57), меняется быстро, имея при этом серию вертикальных асимптот, соответствующих тем энергиям, для которых $Kr_0 = l\pi/2 + n\pi$ (n — целое). Разность энергий между соседними асимптотами равна примерно

$$D \simeq \pi \frac{\hbar^2 K}{mr_0} \simeq \pi \frac{V_0}{K_0 r_0}. \quad (59)$$

Когда энергия изменяется на эту величину, $|q_l|$ почти всюду оказывается порядка или больше Kr_0 , так что почти на всем интервале

$$|q_l - \operatorname{Re} q_l^{(+)}| \gg kr_0 v_l.$$

Второй член в правой части формулы (42) — ρ_l — остается малым (с точностью до слагаемого $n\pi$):

$$\rho_l \simeq \frac{kr_0 v_l}{q_l - \operatorname{Re} q_l^{(+)}} \leq \frac{k}{K} v_l,$$

в то же время *a priori* нет никаких ограничений на величину τ_l . Поэтому справедливо приближенное равенство $\delta_l \simeq \tau_l$. Фазовые сдвиги практически совпадают с теми, которые наблюдаются при рассеянии на твердой сфере того же радиуса. В большей части области изменения энергии потенциал рассеивает каждую парциальную волну подобно твердой сфере: мы имеем дело с «потенциальным рассеянием»; падающая волна практически не проникает во внутреннюю область потенциальной ямы.

Однако существует небольшая область энергий, окружающая точку E_p , где $q_l = \operatorname{Re} q_l^{(+)}$; для этой области

$$|q_l - \operatorname{Re} q_l^{(+)}| \leq kr_0 v_l.$$

Определим величины

$$\gamma = - \frac{dE}{dq_l} \Big|_{E=E_p} \quad (\gamma > 0) \quad \text{и} \quad \Gamma = 2kr_0 v_l \gamma; \quad (60)$$

при этом Γ есть ширина указанной области. Замечаем, что¹³⁾

$$\frac{\Gamma}{D} \approx \frac{2}{\pi} \cdot \frac{k}{K} v_l \ll 1.$$

При изменении энергии на несколько Γ в обе стороны от E_p величина $q_l - \operatorname{Re} q_l^{(+)}$ уменьшается от значений, существенно превосходящих $kr_0 v_l$, до значений, существенно меньших $-kr_0 v_l$, а ρ_l быстро переходит от значений, соседних с $n\pi$, к значениям, близким $(n+1)\pi$. Эффективное сечение σ_l претерпевает резкое изменение, достигая максимального значения $4\pi(2l+1)\lambda^2$: говорят, что имеет место *резонанс l*. По определению E_p есть энер-

¹³⁾ Действительно, согласно уравнению (57):

$$\frac{dq_l}{d(Kr_0)} = -Kr_0 \left[1 + \frac{q_l(q_l - 1)}{(Kr_0)^2} \right].$$

Поскольку $Kr_0 \gg l$ и $|\operatorname{Re} q_l^{(+)}| \leq l$, то $\frac{dq_l}{dK} \simeq -Kr_0^2$, когда $E = E_p$, откуда

$$\gamma \simeq \frac{\hbar^2}{mr_0^2} \quad \text{и} \quad \Gamma \simeq 2v_l \frac{\hbar^2 k}{mr_0}.$$

гия резонанса ¹⁴⁾, Γ — ширина резонанса, причем Γ есть произведение величины γ , зависящей от общего поведения потенциала во внутренней области (и практически не зависящей от l), и фактора $kr_0 v_l$, зависящего от поведения волны во внешней области (и малого при больших l).

Область резонанса достаточно мала, так что можно заменить кривую $q_l(E)$ ее касательной в точке $E = E_p$, откуда

$$\rho_l \approx \operatorname{arctg} \frac{\Gamma}{2(E_p - E)}. \quad (61)$$

Используя условие непрерывности (44) для нормировки радиальной функции во внутренней области, находим в том же приближении (справедливом в интервале энергии, охватывающем резонанс, причем $\Gamma \ll \Delta E \ll D$):

$$y_l = \frac{1}{\sqrt{v_l}} \frac{\Gamma}{\sqrt{4(E - E_p)^2 + \Gamma^2}} K_p j_l(Kr) \quad (r < r_0). \quad (62)$$

Прохождение энергетической области резонанса l сопровождается, таким образом, резким увеличением интенсивности парциальной l -волны во внутренней области потенциальной ямы.

Весь анализ значительно упрощается в случае s -волны, когда

$$\tau_0 = -kr_0, \quad v_0 = 1, \quad \operatorname{Re} q_0^{(+)} = 0, \quad q_0 = Kr_0 \operatorname{ctg} Kr_0.$$

$$\delta_0 = -kr_0 + \operatorname{arctg} \left(\frac{k}{K} \operatorname{tg} Kr_0 \right).$$

Для функции y_0 находим явное выражение:

$$y_0 = \begin{cases} \sin(kr + \delta_0) & r > r_0, \\ \frac{k}{\sqrt{k^2 + K_0^2 \cos^2 Kr_0}} \sin Kr & r < r_0. \end{cases}$$

С учетом замены значений ($L \rightarrow r_0$, $K \rightarrow K_0$, $\eta K \rightarrow k$, $\xi K \rightarrow K$, $\varphi_l \rightarrow \rho_0 - \pi/2$) задача об рассеянии эквивалентна задаче об отражении волн прямоугольной потенциальной ямой в одномерном случае из § III.6 (случай б)) — обсуждение явления резонанса может быть повторено здесь без изменений.

§ 15. Общий закон резонансного рассеяния.

Метастабильные состояния

Явление резонанса довольно часто встречается в микроскопической физике. Резонансное рассеяние, которое мы рассмот-

¹⁴⁾ Ввиду присутствия потенциального рассеяния максимальное значение σ_l достигается при значении энергии, несколько отличающемся от резонансного, которое определяется условием $\rho_l = \pi/2$ (с точностью до слагаемого πl). Может даже оказаться, что в точке резонанса $\tau_l = \pi/2$, и поэтому σ_l обращается в нуль при $E = E_p$; тогда прохождение резонансной области энергии сопровождается резким падением до нуля функции $\sigma_l(E)$.

рели на примере прямоугольной потенциальной ямы, будет иметь место и с потенциалами другой формы, если только в некоторой области пространства потенциал становится резко притягивающим. Ввиду особой важности этого явления дадим здесь более подробное описание резонансного рассеяния l -типа. Мы по-прежнему будем рассматривать прямоугольную яму, однако результаты без труда переносятся на потенциалы более общего вида, так как форма потенциала влияет только на закон изменения логарифмической производной q_l .

Ради простоты изложения предположим, что резонансы достаточно узки и достаточно хорошо отделены друг от друга, так что в изучаемой области энергии присутствует только один резонанс данной парциальной волны. Кроме того, будем считать энергию резонанса столь малой, что

$$kr_0 \ll 1 \quad (63)$$

и что, следовательно, вкладом потенциального рассеяния можно полностью пренебречь¹⁵⁾. Иными словами, все фазовые сдвиги, кроме δ_l , практически равны нулю, а фаза δ_l , как функция начальной энергии E , изменяется по закону

$$\delta_l \approx \rho_l = \operatorname{arctg} \frac{\Gamma}{2(E_p - E)}.$$

Следовательно,

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{\operatorname{tg} \delta_l}{1 - i \operatorname{tg} \delta_l} \approx - \frac{\Gamma}{2(E - E_p) + i\Gamma},$$

и амплитуда рассеяния записывается в форме

$$f(\theta) \approx - \frac{2l+1}{k} P_l(\cos \theta) \frac{\Gamma}{2(E - E_p) + i\Gamma}. \quad (64)$$

При прохождении резонанса модуль и производная фазы комплексной функции $f(\theta)$ обнаруживают острые максимумы. Имеем

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2 = (2l+1)^2 P_l^2(\cos \theta) \kappa^2 \frac{\Gamma^2}{4(E - E_p)^2 + \Gamma^2}, \quad (65)$$

$$\frac{d}{dE} [\arg f(\theta)] = \frac{d\delta_l}{dE} = \frac{2}{\Gamma} \frac{\Gamma^2}{4(E - E_p)^2 + \Gamma^2}. \quad (66)$$

Уравнение (65) показывает, что вблизи резонанса — в той мере, в какой можно пренебречь эффектом потенциального рассеяния, — угловое распределение рассеяния не зависит от энергии, а определяется только моментом импульса l ; при

¹⁵⁾ Вклад этих членов в эффективное сечение порядка $4\pi r_0^2$, а члена l -резонанса в точке резонанса — порядка $4\pi(2l+1)\kappa^2 = 4\pi(2l+1)/k^2$.

этом полное эффективное сечение, как функция энергии, следует «закону Лоренца»:

$$\sigma_{\text{полн}} = 4\pi (2l + 1) \kappa^2 \frac{\Gamma^2}{4(E - E_p)^2 + \Gamma^2}. \quad (67)$$

Для выяснения смысла уравнения (66) следует вернуться к исследованию рассеяния волнового пакета, проведенного в §§ 4, 5. В принятых там обозначениях можно написать

$$\frac{us}{v} = \hbar \frac{d}{dE} [\arg f(\theta)].$$

Следовательно, формула (66) выражает запаздывание в прохождении рассеянной волны (см. сноску⁸). Мы видим, что это запаздывание зависит от энергии падающей частицы по тому же закону Лоренца, что и полное сечение, и достигает максимума $2\hbar/\Gamma$ в точке резонанса.

Полученные результаты позволяют описать явление резонанса следующим образом. В случае энергий, далеких от резонансной, падающая волна практически не проникает во внутреннюю область действия потенциала (ср. уравнение (62)) и все происходит так, как если бы она встретила на своем пути твердую сферу: рассеивается только малая фракция волны, причем рассеяние происходит без запаздывания (запаздывание порядка $-r_0/v$). Если же энергия частицы близка к резонансной энергии, то падающая волна глубоко проникает во внутреннюю область действия потенциала: при этом значительная часть волнового пакета в течение промежутка времени порядка $\hbar/\Gamma$ удерживается во внутренней зоне, а затем испускается в виде рассеянной волны. Этим объясняется большое резонансное эффективное сечение рассеяния. В течение указанного промежутка времени перед испусканием рассеянной волны вероятность присутствия частицы во внутренней области действия потенциала оказывается очень большой и по порядку величины равной соответствующей вероятности для связанного состояния. Однако если связанное состояние является стационарным и имеет бесконечно большое время жизни, то рассматриваемое *метастабильное* состояние имеет конечное время жизни порядка $\hbar/\Gamma$. Учитывая соотношение неопределенности время-энергия, мы приходим к выводу, что такое состояние не имеет точно определенной энергии и должно быть представлено волновым пакетом с дисперсией по энергии порядка Γ . Таким образом, каждому резонансу сопоставляется метастабильное состояние с конечным временем жизни $\hbar/\Gamma$, причем среднее значение энергии состояния равно энергии резонанса E_p , а дисперсия энергии равна ширине резонанса Γ .

§ 16. Наблюдение времени жизни метастабильных состояний

Приведенное выше полуклассическое описание резонансного рассеяния не свободно от противоречий. Дело в том, что в обычных экспериментальных условиях измерения эффективных сечений (указанных в §§ 4—6) выявление метастабильных состояний, о которых шла речь выше, невозможно. Для измерения эффективного сечения рассеяния при заданной энергии частицы необходимо, чтобы дисперсия энергии ΔE была настолько мала, чтобы амплитуда рассеяния на интервале ΔE оставалась практически постоянной; в резонансной области это означает $\Delta E \ll \Gamma$. Только при выполнении этого условия можно действительно измерить ход изменения эффективного сечения в резонансной области. Однако при этом время столкновения $\hbar/\Delta E$, т. е. время, необходимое для полного проникновения волнового пакета во внутреннюю область действия потенциала, оказывается значительно больше времени жизни $\hbar/\Gamma$ метастабильного состояния. Это последнее становится таким образом ненаблюдаемым (см. сноску ⁴).

Чтобы выявить метастабильное состояние, следует осуществить «дополнительные» (в смысле Бора) условия эксперимента

$$\Delta E \gg \Gamma. \quad (68)$$

Для определенности (см. сноску ⁴) рассмотрим волновой пакет изученного в § 5 типа, который удовлетворяет одновременно условиям (9) и условию (68). Предположим, кроме того, что $E_p \gg \Delta E \gg \Gamma$ ¹⁶). Мы используем обозначения §§ 4—6 и примем, что $b = 0$ и $t_0 = 0$. Подставляя в (17) выражение (64) для $f(\theta)$, получим следующую асимптотическую форму рассеянного волнового пакета:

$$\Psi^{(d)} \sim -(2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\Gamma}{2} \cdot \frac{e^{i(k_p r - \frac{E_p t}{\hbar})}}{r} I,$$

где

$$I = \int \frac{A(k' - k)}{E' - E_p + \frac{i}{2} \Gamma} e^{i[(k' - k_p) r - \frac{E' - E_p}{\hbar} t]} \frac{dk'}{k'}$$

$$\left(\text{здесь мы обозначили } E_p = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m} = \frac{mv_p^2}{2} \right).$$

Основной вклад в интеграл I дает область, где велико значение $A(k' - k) / (E' - E_p + \frac{i}{2} \Gamma)$. Переходя к сферическим координатам, положим

$$dk' = k'^2 d\Omega' dk' = \frac{mk'}{\hbar^2} d\Omega' dE'$$

и $k' = k'u'$. Интегрирование по углам касается только функции $A(k' - k)$. Что касается интегрирования по E' , то согласно предположению (68) существенной областью является $|E' - E_p| \leq \Gamma$, где функция $A(k' - k)$ может быть

¹⁶) Это предположение, а также условие (63) не являются существенными, но они позволяют выразить окончательный результат в более простой форме. Для выполнения этих условий совместно с (9) и (68) необходимо потребовать $v_i \ll kv_0 \ll 1$.

заменена на $A(k_p u' - k)$, а k' — на первые два члена разложения Тейлора (считаем $\Gamma \ll E_p$):

$$k' \simeq k_p + \frac{1}{\hbar v_p} (E' - E_p).$$

Поэтому можно написать

$$I \simeq \frac{m}{\hbar^2} A_p F \left(t - \frac{r}{v_p} \right),$$

где мы обозначили

$$A_p = \int A(k_p u' - k) d\Omega',$$

$$F(\tau) = \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} (E' - E_p) \tau}}{E' - E_p + \frac{i}{2} \Gamma} dE'.$$

Читатель без труда проверит, что это выражение для I справедливо только, если $|\tau| \gg \hbar/\Delta E$. Заметим, что

$$F(\tau) = \int_{-\frac{2E_p}{\Gamma}}^\infty \frac{e^{-i \frac{1}{2\hbar} \tau z}}{z + i} dz.$$

Поскольку $|\tau| \gg \hbar/\Delta E_p$, нижний предел интегрирования можно заменить на $-\infty$ и тогда интеграл $F(\tau)$ вычисляется по теории вычетов; именно

$$F(\tau) = \begin{cases} 0, & \text{если } \tau \ll -\hbar/\Delta E < 0; \\ -2\pi i e^{-\Gamma \tau/2\hbar}, & \text{если } \tau \gg \hbar/\Delta E > 0. \end{cases} \quad (69)$$

Окончательно получаем

$$\Psi^{(d)} \sim -(2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{mA_p}{2\hbar^2} \Gamma \cdot F \left(t - \frac{r}{v_p} \right) \frac{e^{i \left(k_p r - \frac{E_p t}{\hbar} \right)}}{r}. \quad (70)$$

Общее поведение этой волновой функции определяется свойствами функции $F(\tau)$, вытекающими из (69). Это расходящаяся волна, ограниченная спереди волновым фронтом, перемещающимся по закону $r = v_p t$. В каждой данной точке интенсивность волны сначала равна нулю, затем она резко изменяется от 0 до некоторого положительного значения — это соответствует прохождению волнового фронта, оно продолжается примерно в течение времени $\hbar/\Delta E$, что значительно меньше $\hbar/\Gamma$; затем интенсивность уменьшается по закону $\exp(-\Gamma t/\hbar)$.

На опыте, чтобы обнаружить этот закон экспоненциального затухания, в течение короткого промежутка времени посылают пучок волновых пакетов, отвечающих указанным выше условиям, и регистрируют с помощью детектора на расстоянии D от рассеивающего центра число частиц, рассеянных в направлении телесного угла $(\Omega, \Omega + d\Omega)$. Поскольку дисперсия энергии¹⁷⁾ падающих волновых пакетов очень велика ($\Delta E \gg \Gamma$), момент столкновения $t = 0$ определяется точно: $\Delta t \ll \hbar/\Gamma$. Количество детектируемых частиц определяет-

¹⁷⁾ Это дисперсия энергии каждого волнового пакета отдельно.

ся величиной $|\Psi^{(d)}|^2$ в точке нахождения счетчика; согласно уравнению (70), она пропорциональна $F^2(t - D/v)$. Частицы не регистрируются до момента времени D/v , когда фронт волны достигает счетчика; это время, необходимое для того, чтобы частица, испущенная центром с «резонансной скоростью» v , достигла счетчика. В дальнейшем число регистраций частиц определяется законом $\exp(-\Gamma/\hbar)$, что и соответствует образованию в момент времени $t = 0$ метастабильного состояния со временем жизни $\hbar/\Gamma$.

Указанные выше условия эксперимента обычно осуществляются при радиоактивном распаде ядер (α - и β -радиоактивность, γ -радиоактивность изомерных ядер).

Раздел V. РАЗЛИЧНЫЕ ФОРМУЛЫ И СВОЙСТВА

§ 17. Интегральные представления фазовых сдвигов

Некоторые свойства и методы вычисления фазовых сдвигов могут быть получены из соответствующих интегральных представлений. Интегральные представления фазовых сдвигов очень разнообразны. Чаще всего они получаются простым применением теоремы вронскиана к подходящим образом выбранным решениям радиального уравнения. Одно такое представление мы дадим в этом параграфе. Другое будет изучено в § 20.

Наша цель состоит в сравнении фазовых сдвигов δ_l и $\hat{\delta}_l$, соответствующих потенциалам $V(r)$ и $\hat{V}(r)$ при одной и той же энергии. Вернемся к обозначениям § 8 и положим $U = 2m\hat{V}/\hbar^2$. Пусть y_l — регулярное решение уравнения (29), причем асимптотическая форма y_l дается формулой (37). Тогда $\hat{y}_l$ — регулярное решение радиального уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\epsilon - \hat{U} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] \hat{y}_l = 0 \quad (71)$$

с асимптотической формой

$$\hat{y}_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \hat{\delta}_l \right).$$

Вронскиан $W(y_l, \hat{y}_l)$ равен нулю в начале координат и стремится асимптотически к пределу

$$\lim_{r \rightarrow \infty} W(y_l, \hat{y}_l) = k \sin(\delta_l - \hat{\delta}_l).$$

Согласно теореме вронскиана

$$W(y_l - \hat{y}_l)|_a^b = - \int_a^b \hat{y}_l (U - \hat{U}) y_l dr.$$

Устремляя пределы интегрирования a и b к 0 и ∞ соответственно, находим

$$\sin(\delta_l - \hat{\delta}_l) = - \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty \hat{y}_l (V - \hat{V}) y_l dr. \quad (72)$$

Это важное соотношение справедливо независимо от вида потенциалов V и $\hat{V}$, если только оба они на бесконечности стремятся к нулю быстрее $1/r$ и не имеют сингулярности в нуле типа $1/r^2$ и выше.

Если $\hat{V} = 0$, то $\hat{\delta}_l = 0$ и $\hat{y}_l = kr j_l(kr)$ соотношение (72) в этом частном случае записывается в виде

$$\sin \delta_l = - \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} j_l(kr) V y_l r dr. \quad (73)$$

§ 18. Зависимость фазовых сдвигов от формы потенциала

Уравнение (72) позволяет сделать некоторые выводы об изменении фазовых сдвигов при модификации рассеивающего потенциала. При бесконечно малом изменении потенциала $\Delta V \equiv V - \hat{V}$ величина $\Delta \delta_l = \delta_l - \hat{\delta}_l$ также будет бесконечно малой; если при этом пренебречь различием между y_l и $\hat{y}_l$ в правой части уравнения (72), то получим

$$\Delta \delta_l = - \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} y_l^2 \Delta V dr. \quad (74)$$

Если изменение потенциала $\Delta V(r)$ сохраняет некоторый знак на всем интервале $(0, \infty)$, то изменение фазового сдвига $\Delta \delta_l$ имеет противоположный знак. Следовательно, всякое увеличение потенциала (большее отталкивание) уменьшает фазовый сдвиг, всякое уменьшение потенциала (большее притяжение) увеличивает сдвиг фазы.

До сих пор сдвиг фазы δ_l был определен только с точностью до слагаемого $2\pi l$. Чтобы снять эту неоднозначность, рассмотрим непрерывное изменение потенциала от 0 до $V(r)$, при этом фазовый сдвиг изменяется также непрерывно от 0 до некоторого значения δ_l , которое, как можно показать, не зависит от пути изменения потенциала от нуля до $V(r)$. Именно это значение δ_l мы примем в качестве истинной величины фазового сдвига.

Если потенциал $V(r)$ всюду отталкивающий, то переход от нуля к $V(r)$ можно осуществить путем последовательного прибавления бесконечно малых положительных добавок. Согласно уравнению (74) каждая из этих добавок уменьшает фазовый сдвиг, поэтому δ_l отрицательно. Аналогичным образом, если потенциал $V(r)$ всюду притягивающий, то δ_l положительно.

В общем случае:

$$\begin{aligned} \text{если } V(r) > \hat{V}(r) \quad \text{при любых } r, \quad \text{то } \delta_l < \hat{\delta}_l, \\ \text{если } V(r) < \hat{V}(r) \quad \text{при любых } r, \quad \text{то } \delta_l > \hat{\delta}_l. \end{aligned}$$

§ 19. Приближение Борна

Для того чтобы точно вычислить фазовый сдвиг δ_l , надо, вообще говоря, решить уравнение (29). Однако если $V(r)$ достаточно мал, регулярное решение y_l этого уравнения мало отличается от свободной сферической волны $krj_l(kr)$, и фазовый сдвиг близок к нулю. Поэтому приближенно можно в уравнении (73) заменить y_l на свободную волну, что дает

$$\delta_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^\infty j_l^2(kr) V(r) r^2 dr. \quad (75)$$

Это выражение для фазового сдвига в «*приближении Борна*».

Ошибка мала, если потенциал $V(r)$ достаточно мал по сравнению с $E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ в большей части области изменения r . Можно ожидать поэтому, что приближение Борна будет оправдано при высоких энергиях или (при условии, что $V(r)$ достаточно быстро уменьшается на бесконечности) при больших значениях l . В действительности выражение (75) является только первым членом в разложении по степеням потенциала V , поэтому ошибку можно оценить, вычисляя следующие члены разложения. Исходя из соотношения (72), можно получить аналогичное приближенное выражение для $\delta_l - \hat{\delta}_l$, а именно

$$\delta_l - \hat{\delta}_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int g_l^2(V - \hat{V}) dr. \quad (76)$$

Эта «обобщенная формула Борна» полезна, когда известно регулярное решение $\hat{y}_l$ радиального уравнения с потенциалом $\hat{V}$, мало отличающимся от потенциала V . Она позволяет получить в хорошем приближении δ_l , не решая точно радиальное уравнение с потенциалом V ¹⁸⁾.

§ 20. Теория эффективного радиуса действия. Формула Бете

Формулы § 17 позволяют исследовать изменение фазовых сдвигов при модификации потенциала при данном значении энергии. В этом параграфе мы рассмотрим изменение фазовых

¹⁸⁾ Формулой (76) можно воспользоваться также, чтобы изучить влияние «хвоста» потенциала V . Достаточно в качестве $\hat{V}$ выбрать потенциал

$$\hat{V} = \begin{cases} V(r), & \text{если } r < r_0, \\ 0, & \text{если } r > r_0, \end{cases}$$

где r_0 — подходящим образом выбранное расстояние. $\hat{V}$ есть потенциал с ограниченным радиусом действия и обладает всеми его свойствами. $V - \hat{V}$ — хвост потенциала V . Влияние «хвоста», если оно мало, может быть учтено с помощью формулы (76).

сдвигов в зависимости от изменения энергии. Полученные формулы будут особенно полезны в предельном случае малых энергий, когда потенциал имеет короткий радиус действия.

Пусть u — одно из регулярных решений уравнения (29); пока мы не будем уточнять его нормировку. Пусть $\hat{u}$ есть решение (нерегулярное) уравнения (71), соответствующее тому же значению энергии и имеющее ту же асимптотическую форму, что и u , включая нормировку. Рассмотрим теперь два различных значения энергии E_1 и E_2 ; будем отмечать индексами 1 и 2 все величины, относящиеся к этим энергиям. По теореме вронскиана (III. 27) имеем

$$W(u_1, u_2)|_a^b = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int_a^b u_1 u_2 dr,$$

и соответствующее выражение для $\hat{u}$, откуда

$$W(\hat{u}_1, \hat{u}_2) - W(u_1, u_2)|_a^b = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int_a^b (\hat{u}_1 \hat{u}_2 - u_1 u_2) dr.$$

Когда $b \rightarrow \infty$, то поскольку u и $\hat{u}$ имеют одну асимптотическую форму, интеграл в правой части уравнения сходится, а разность вронскианов на верхнем пределе обращается в нуль. Поскольку, кроме того, $\lim_{a \rightarrow 0} W(u_1, u_2) = 0$, написанная формула при $b \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$ переходит в

$$\lim_{a \rightarrow 0} \left[W(\hat{u}_1, \hat{u}_2) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int_a^\infty (\hat{u}_1 \hat{u}_2 - u_1 u_2) dr \right] = 0. \quad (77)$$

Выбирая подходящим образом нормировку u , можно из этой формулы найти значения разности $\delta - \hat{\delta}$ при энергиях E_1 и E_2 .

Ограничимся случаем z -волны ($l = 0$)¹⁹⁾. Кроме этого, положим $V = 0$ и обозначим через v_1, v_2 значения $\hat{u}_1, \hat{u}_2$ в этом частном случае. Фиксируем нормировку u условием $v(0) = 1$, т. е.

$$v = \cos kr + \operatorname{ctg} \delta \cdot \sin kr.$$

Тогда формула (77) запишется в виде

$$\begin{aligned} W(v_2, v_1)|_{a=0} &\equiv k_1 \operatorname{ctg} \delta_1 - k_2 \operatorname{ctg} \delta_2 = \\ &= (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int (v_1 v_2 - u_1 u_2) dr. \end{aligned} \quad (78)$$

¹⁹⁾ Когда $l \neq 0$, функции $\hat{u}_1$ и $\hat{u}_2$ имеют особенность в начале координат типа $(1/r)^l$. В формуле (77) члены $W(\hat{u}_1, \hat{u}_2)$ и $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int \hat{u}_1 \hat{u}_2 dr$ расходятся как $(1/a)^{2l-1}$, однако сумма их стремится к конечному пределу.

В предположении, что $V(r)$ стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$ достаточно быстро, так чтобы интеграл в правой части сходиллся, эта формула остается справедливой в пределе $\varepsilon_2 \rightarrow 0$. Обозначим с помощью u_0, v_0 функции u, v при энергии равной нулю. Замечаем, что

$$v_0 = 1 - \frac{r}{a} \quad \text{и} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a},$$

где a — длина рассеяния, определяемая уравнением (47). Выбирая значения $\varepsilon_1 = \varepsilon, \varepsilon_2 = 0$ в соотношении (78) (см. рис. 35), получаем формулу Бете:

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a} + \varepsilon \int (vv_0 - uu_0) dr. \quad (79)$$

Это строгое соотношение. Оно полезно, когда интеграл в правой части медленно меняется как функция энергии.

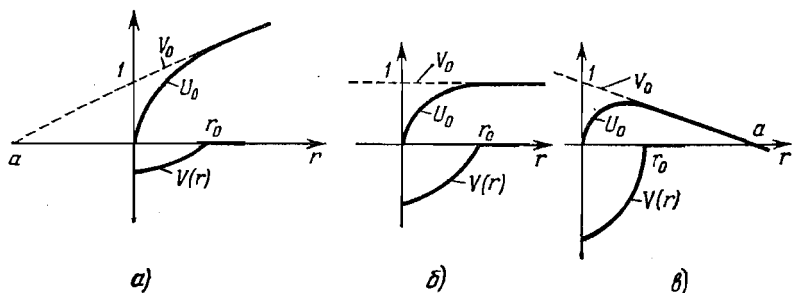


Рис. 35. Волновые s -функции нулевой энергии в теории эффективного радиуса действия для последовательно увеличивающейся глубины потенциала ограниченного радиуса действия $V(r) = \omega W(r)$ (ω — параметр глубины ямы, при этом $\omega = 1$ соответствует глубине, необходимой для образования связанного состояния): а) $\omega < 1$ ($a < 0$); б) $\omega = 1$ ($a = \infty$); в) $\omega > 1$ ($a > 0$). Замечание. a является убывающей функцией ω , имеющей вертикальную асимптоту при каждом значении ω , для которого существует связанное состояние с нулевой энергией.

Именно это имеет место в случае короткодействующего потенциала $V(r)$ того типа, что мы встречаем в ядерной физике, когда можно разделить все пространство на внутреннюю область ($r < r_0, kr_0 \ll 1$), для которой $|V| \gg E$, и внешнюю область ($r > r_0$), где потенциал V пренебрежимо мал. Основной вклад в интеграл дает внутренняя область, где без большой ошибки можно заменить u на u_0 и v на v_0 , так как в начале координат $u = u_0 = 0$ и $v = v_0 = 1$ и относительная кривизна функций u и u_0 практически одинакова ($u''/u \simeq 2mV/\hbar^2$) во всей этой области (рис. 35). Таким образом, в очень хорошем приближении

имеем

$$k \operatorname{ctg} \delta \simeq -\frac{1}{a} + \varepsilon \int_0^{\infty} (v_0^2 - u_0^2) dr. \quad (80)$$

Величина $r_{\text{эфф}} \equiv 2 \int_0^{\infty} (v_0^2 - u_0^2) dr$ обычно называется *эффективным радиусом* — это параметр, характеризующий свойства потенциала.

Правая часть уравнения (80) по существу представляет два первых члена в разложении $k \operatorname{ctg} \delta$ по степеням энергии. Чтобы выписать члены более высокого порядка, надо получить разложения u и v в виде рядов по степеням ε и подставить эти ряды в правую часть (79)²⁰). Основываясь на аргументах, приведенных выше, следует ожидать, что получающиеся ряды быстро сходятся во внутренней области, поэтому и сходимость разложения для $k \operatorname{ctg} \delta$ также будет хорошей.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Рассматривается рассеяние частицы с длиной волны λ на потенциале $V(r)$, который при $r \rightarrow \infty$ стремится к нулю быстрее $1/r$. Пусть $f(\Omega)$ — амплитуда рассеяния в направлении $\Omega = (\theta, \varphi)$. Показать, что

$$\sigma_{\text{полн}} = \int |f(\Omega)|^2 d\Omega = 4\pi\lambda \operatorname{Im} f(0),$$

где $f(0)$ обозначает амплитуду рассеяния вперед ($\theta = 0$). Это соотношение Бора — Пайерлса — Плачека.

2. При бомбардировке ядер типа A ядрами типа a могут образовываться ядра b и B : $a + A \rightarrow b + B$. В лабораторной системе мишень A покоится. Пусть m_a, m_A, m_b, m_B — массы частиц, участвующих в реакции. В нерелятивистском приближении $m_a + m_A = m_b + m_B$. Пусть E_i и E_f — полные кинетические энергии начального ($a + A$) и конечного ($b + B$) состояний в системе центра масс, а θ и θ_1 — углы испускания частицы b в системе центра масс и в лабораторной системе соответственно. Показать, что зависимость θ_1 от θ дается соотношением (24), если τ представляет отношение скорости центра масс V к скорости v_b частицы b в системе центра масс, т. е.

$$\tau = \frac{V}{v_b} = \left[\frac{m_a m_b}{m_A m_B} \frac{E_i}{E_f} \right]^{1/2}.$$

²⁰) См. G. Chew, M. Goldberger, Phys. Rev. 75, 1637 (1949); H. A. Bethe, Phys. Rev. 76, 38 (1949).

3. Вывести следующие соотношения между величинами τ_l , v_l и $q_l^{(+)}$, введенными в § 10 (определение (41)):

$$v_l = -\frac{d\tau_l}{d\xi}, \quad \text{Im } q_l^{(+)} = \xi v_l, \quad \text{Re } q_l^{(+)} = -\frac{\xi}{2v_l} \frac{dv_l}{d\xi}.$$

4. Показать, что в приближении ВКБ фазовый сдвиг δ_l выражается формулой

$$\delta_l = \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\int_a^R \sqrt{k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}} dr - \int_{a_0}^R \sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}} dr \right].$$

Определения δ_l , k и $U(r)$ те же, что и в § 8; нижние пределы интегрирования a и a_0 являются нулями подынтегральных выражений (если $k^2 - U(r) - l(l+1)/r^2$ имеет несколько корней, то a равен наибольшему из них). Обсудить условия справедливости этого приближения. Для того чтобы формула была применима для малых значений l , нужно, следуя рекомендации Лангера (см. задачу IX.6), заменить в обоих интегралах $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$.

5. Применить теорию эффективного радиуса действия к p -рассеянию. Показать, что она дает разложение $k^3 \text{ctg } \delta_l$ в ряд по степеням энергии и найти два первых члена разложения (δ_l — сдвиг p -фазы).

§ 1. Введение

Пусть r — взаимное расстояние между двумя частицами с электрическими зарядами Z_1e и Z_2e соответственно, тогда электростатический потенциал взаимодействия частиц

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

называется кулоновским потенциалом. Пусть p_1, p_2 — импульсы, r_1, r_2 — векторы положения этих двух частиц ($r = r_1 - r_2$). Если их взаимодействие чисто кулоновское, то движение частиц определяется гамильтонианом

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}.$$

Движение центра масс отделяется методом, изложенным в гл. IX. Движению «относительной частицы» соответствует гамильтониан

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (1)$$

причем m есть приведенная масса

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (2)$$

Исследование поведения квантовой системы из двух частиц, находящихся в кулоновском взаимодействии, сводится к задаче о движении частицы в поле потенциала $Z_1 Z_2 e^2 / r$.

Ввиду медленности спадания при больших значениях r некоторые свойства центрально-симметричных потенциалов, полученные в гл. IX и X, несправедливы для кулоновского потенциала. В задачах о рассеянии, например, асимптотическое поведение стационарных решений оказывается менее простым, чем в случае потенциалов ограниченного радиуса действия, поэтому определение фазовых сдвигов должно быть соответственно изменено. Само рассмотрение задачи методом разделения угловых и радиальных переменных оказывается не столь полезным,

так как разложение амплитуды рассеяния по сферическим функциям сходится очень медленно.

Но, с другой стороны, решение уравнения Шредингера для частицы в кулоновском поле может быть во всех случаях сведено к решению дифференциального уравнения Лапласа, хорошо известного в математической физике. Поэтому наиболее интересные величины — спектр энергии связанных состояний и эффективное сечение рассеяния — могут быть вычислены точно.

Эта глава содержит два раздела. Первый посвящен изучению связанных состояний атома водорода; исследование без труда распространяется на водородоподобные атомы и вообще системы из двух частиц, взаимодействующих по закону $1/r$. Во втором разделе рассматривается задача о кулоновском рассеянии.

Раздел I. АТОМ ВОДОРОДА

§ 2. Уравнение Шредингера для атома водорода

Наиболее простой системой двух частиц, взаимодействующих по закону Кулона, является атом водорода. Две частицы, протон и электрон, имеют потенциал взаимодействия $-e^2/r$. Приведенная масса системы электрон-протон несколько меньше массы электрона: $(m_e - m)/m_e \simeq 5 \cdot 10^{-4}$.

Пусть E — энергия системы электрон-протон в системе центра масс, тогда волновая функция «относительной частицы» является решением уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Свойства регулярных решений этого уравнения выясняются без труда, если произвести разделение угловых и радиальных переменных. Так, собственное решение, соответствующее энергии E и моменту импульса (lm) , выражается функцией

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{y_l(r)}{r},$$

где y_l — обращающееся в нуль в начале координат решение радиального уравнения (ср. уравнение (IX.20))

$$y_l'' + \left[\varepsilon + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l = 0. \quad (4)$$

Здесь мы ввели обозначение

$$\varepsilon = 2mE/\hbar^2. \quad (5)$$

Если $E > 0$, то решение бесконечно осциллирует в асимптотической области и может быть принято в качестве собственного

решения при любых положительных E . Решение описывает несвязанное состояние и используется при построении стационарного состояния рассеяния системы электрон-протон при энергии E .

Если $E < 0$, то асимптотическая форма регулярного в начале координат решения представляет собой линейную комбинацию экспоненциальных функций $e^{\kappa r}$ и $e^{-\kappa r}$, где

$$\kappa = \sqrt{-\varepsilon} = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \quad (6)$$

Это решение допустимо в качестве собственного только при некоторых привилегированных значениях E , когда присутствует только затухающая экспонента. Указанные значения образуют дискретный спектр атома водорода, а соответствующие волновые функции представляют возможные связанные состояния этого атома.

В этом разделе мы рассматриваем связанные состояния атома водорода, но результаты исследования без труда переносятся на случай водородоподобных атомов (He^+ , Li^{++} и т. д.), в которых протон заменяется более тяжелым ядром. Пусть M_A — масса этого ядра, M_p — масса протона. Приведенная масса водородоподобного атома

$$m' = \frac{m_e M_A}{m_e + M_A}$$

несколько отличается от приведенной массы атома водорода

$$m = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p}.$$

Если заряд ядра равен Z_e , то потенциал кулоновского взаимодействия есть Ze^2/r . Все формулы, относящиеся к атому водорода, могут быть применены и в случае водородоподобного атома, если сделать замену $m \rightarrow m'$ и $e^2 \rightarrow Ze^2$.

§ 3. Порядок величины энергии связи основного состояния

Пусть r_0 — «радиус» атома в его основном состоянии. Мы имеем в виду, что волновая функция «концентрируется» внутри сферы радиуса r_0 , иначе говоря, что вероятность присутствия электрона на расстоянии r от протона очень мала при $r > r_0$, но принимает отличные от нуля значения при $r < r_0$. В качестве очень грубой модели можно представлять себе, что плотность вероятности является постоянной внутри сферы радиуса r_0 .

Ясно, что среднее значение потенциальной энергии тем меньше (в алгебраическом смысле), чем меньше r_0 : это величина порядка $-e^2/r_0$. Напротив, среднее значение кинетической

энергии тем больше, чем меньше r_0 . Если электрон локализован в сфере радиуса r_0 , то соотношения неопределенности ставят нижний предел значению его импульса; среднее квадратичное отклонение импульса не может быть меньше $\hbar/r_0$, следовательно, кинетическая энергия равна, по меньшей мере, $\hbar^2/2mr_0^2$. Полная энергия, таким образом, равна по меньшей мере сумме двух величин $\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$ и $-\frac{e^2}{r_0}$. Минимум достигается при $r_0 = \hbar^2/me^2$. Мы должны ожидать, что значение энергии при этом минимуме

$$E_1 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{me^4}{\hbar^2} \quad (= -13,5 \text{ эв}) \quad (7)$$

по порядку величины равно энергии основного состояния, а соответствующее значение радиуса

$$a = \hbar^2/me^2 \quad (= 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}) \quad (8)$$

дает порядок величины протяженности волновой функции в основном состоянии.

По случайному совпадению оказывается, что энергия основного состояния точно равна формуле (7). Длина a называется *радиусом Бора* или «радиусом атома водорода».

§ 4. Решение уравнения Шредингера в сферических координатах

Для решения уравнение Шредингера воспользуемся сферическими координатами; как и в случае любого центрально-симметричного потенциала угловые и радиальные переменные в этой системе координат разделяются, и проблема сводится к нахождению регулярных решений радиального уравнения (4). Решение уравнения Шредингера можно осуществить также в параболических координатах — в этой системе координат переменные также разделяются. Здесь мы ограничимся только упоминанием этого важного обстоятельства и рассмотрим задачу в сферических координатах.

Если произвести замену переменной

$$x = 2\pi r, \quad (9)$$

то уравнение (4) будет зависеть только от безразмерного параметра

$$\nu = \frac{1}{\kappa a} = \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{mc^2}{-2E}}, \quad (10)$$

асимптотической области ведет себя как $x^{-\nu}e^{x/2}$ и задача на собственные значения не имеет решения.

Однако при некоторых особых значениях ν коэффициенты ряда, начиная с некоторого, обращаются в нуль, и гипергеометрический ряд сводится к полиному. Для этого необходимо, чтобы $l+1-\nu$ было равно целому отрицательному числу или нулю, т. е.

$$\nu = n = l + 1 + n' \quad (n' = 0, 1, 2, \dots, \infty). \quad (14)$$

В этом случае гипергеометрический ряд сводится к полиному степени n' , радиальная функция при $x \rightarrow \infty$ ведет себя как $x^n e^{-x/2}$ и решение уравнения Шредингера оказывается приемлемым в качестве собственного решения.

Условие квантования (14) дает уровни энергии связанных состояний с моментом импульса (lm). Каждый из них определяется значением целого числа n' . Волновая функция соответствующего связанного состояния (не нормированная) строится с помощью радиального решения

$$y_l = x^{l+1} e^{-x/2} \sum_{p=0}^{n'} \frac{n'! (2l+1)!}{(n'-p)! (2l+1+p)!} \frac{(-x)^p}{p!}. \quad (15)$$

Полином степени n' в правой части этого равенства, есть (с точностью до постоянного множителя) обобщенный полином Лагерра $L_n^{2l+1}(x)$, определение которого и основные свойства приводятся в дополнении Б (§ 2).

§ 5. Спектр энергии. Вырождение

Заменяя в равенстве (14) параметр ν его выражением (10), находим спектр энергии состояний с моментом импульса l :

$$E_{ln'} = - \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{mc^2}{2(l+1+n')^2}, \quad (16)$$

причем радиальное квантовое число n' равно числу узлов радиальной части волновой функции. Спектр содержит бесконечное счетное множество уровней, так как число n' может принимать все целые значения от 0 до $+\infty$. Когда $n' \rightarrow \infty$, уровни становятся все более близкими друг другу и в пределе стремятся к значению $E=0$, с которого начинается непрерывный спектр.

Это обстоятельство характерно для потенциалов с большим радиусом действия. Напротив, короткодействующие потенциалы, например, типа прямоугольной потенциальной ямы, приводят к конечному числу связанных состояний (а иногда и к полному отсутствию их). Можно показать в самом общем случае, что множество уровней энергии является бесконечным счетным (с

точкой накопления $E = 0$), если потенциал, будучи отрицательным, асимптотически стремится к нулю медленней функции $1/r^2$:

$$r^2 V \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} -\infty$$

и это множество конечно или, может быть, пусто, если потенциал асимптотически стремится к нулю быстрее $1/r^2$.

Объединение спектров, относящихся к различным возможным значениям $l = 0, 1, 2, \dots, \infty$, дает полный спектр атома водорода согласно теории Шредингера. Полный спектр, таким образом, образуется последовательностью чисел E_{ln} , определенных уравнением (16), причем l и n' могут принимать все целые неотрицательные значения. Замечаем, что значения энергии зависят, в действительности, от суммы $l + n'$, или, что то же самое, от «главного квантового числа»

$$n = l + n' + 1.$$

Имеем

$$E_n = - \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{mc^2}{2n^2} \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (17)$$

При каждом значении энергии E_n , т. е. при каждом значении главного квантового числа n , момент импульса l может принимать все целые значения от 0 до $n - 1$. Поэтому вырождение уровня E_n имеет кратность

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n(n - 1) + n = n^2.$$

Подпространство собственных функций с числом измерений n^2 натянуто на n^2 функций, каждая из которых соответствует определенному состоянию момента импульса (lm); при этом «азимутальное квантовое число» l может принимать n значений

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1,$$

а «магнитное квантовое число» — $(2l + 1)$ значений

$$m = -l, -l + 1, \dots, +l.$$

По спектроскопической традиции различные собственные значения энергии обозначаются целым положительным числом n и сопровождающей буквой ($s, p, d, f, g, \dots$), указывающей на значение l в соответствии с принятым соглашением, о котором мы говорили в предшествующей главе; квантовое число m , указывающее на ориентацию системы, опускается. Так, основное состояние есть состояние $1s$. Первое возбужденное состояние четырехкратно вырождено и включает одно состояние $2s$ и три состояния $2p$; второе возбужденное состояние девятикратно вы-

рождено и включает одно состояние $3s$, три состояния $3p$ и пять состояний $3d$ и т. д. (рис. 36).

Этот спектр совпадает с тем, который предсказывала старая квантовая теория; мы уже указывали на замечательное совпадение этого результата с экспериментальными данными. Настоящая теория хорошо предсказывает расположение спектральных линий, но не может объяснить тонкую структуру спектра. Недостаток теории в том, что она нерелятивистская. Релятивистские эффекты в определении положения уровней оказываются порядка v^2/c^2 , т. е. примерно E_n/mc^2 : релятивистские поправки

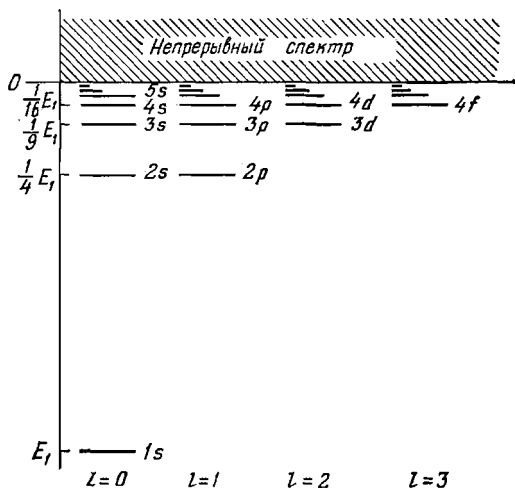


Рис. 36. Спектр атома водорода.

должны быть порядка $10^{-4} - 10^{-5}$. С другой стороны, теория Шредингера не учитывает спин электрона, т. е. внутреннюю степень свободы электрона, не имеющую классического аналога — этот вопрос будет обсуждаться в гл. XIII (т. II). К анализу тонкой структуры спектра атома водорода мы вернемся в гл. XX (т. II) при изложении основ релятивистской квантовой механики электрона.

§ 6. Собственные функции связанных состояний

Собственные функции, принадлежащие уровню энергии E_n , являются линейными комбинациями n^2 линейно независимых функций. Результаты § 4 дают нам n^2 собственных ортогональных функций, принадлежащих заданным значениям момента

импульса. Так, волновая функция квантового состояния (nlm) записывается в виде

$$\psi_{nlm} = a^{-3/2} N_{nl} F_{nl} \left(\frac{2r}{na} \right) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (18)$$

где

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x), \quad (18')$$

а N_{nl} — постоянная нормировки. Норму ψ_{nlm} можно вычислить, воспользовавшись производящей функцией полиномов Лагерра (Б.15). Норма будет равна 1, если взять

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}. \quad (18'')$$

Поучительно найти средние значения последовательных степеней r в квантовом состоянии (nlm) . Мы не будем здесь производить подробных вычислений (задача 1), результаты даны в дополнении Б, § 3. В частности, имеем

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)]. \quad (19)$$

Следовательно, электрон в среднем находится тем дальше от протона, чем больше n . Для основного состояния находим $\langle r \rangle_{1s} = 3a/2$ в согласии с грубой оценкой § 3.

Когда l принимает свое наибольшее значение $n-1$, волновая функция имеет особенно простой вид: это есть произведение $Y_l^m(\theta, \varphi)$ на радиальную функцию

$$[(2n)!]^{-1/2} \left(\frac{2}{na} \right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na} \right)^{n-1} e^{-r/na}.$$

Среднее значение r в этом состоянии равно

$$\langle r \rangle = \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2}{na} \right)^3 \int_0^\infty \left(\frac{2r}{na} \right)^{2n-2} e^{-2r/na} r^3 dr = n \left(n + \frac{1}{2} \right) a$$

в согласии с общей формулой, приведенной выше. Аналогичное вычисление дает:

$$\langle r^2 \rangle = n^2 (n + 1/2) (n + 1) a^2,$$

откуда получаем выражение для радиального среднего квадратичного отклонения:

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \frac{na}{2} \sqrt{2n+1} = \frac{\langle r \rangle}{\sqrt{2n+1}}.$$

При очень больших значениях n величина $\Delta r / \langle r \rangle$ становится малой, так что электрон оказывается практически локализованным вблизи сферы радиуса $n^2 a$, в то время как энергия уровня

$-e^2/2n^2a$ совпадает с энергией классического электрона на круговой орбите радиуса n^2a .

Этот частный пример подтверждает общее правило соответствия, по которому в пределе больших квантовых чисел должны быть справедливы классические законы движения. Чтобы детально сравнивать результаты квантовой и классической теорий, следует исследовать движение волновых пакетов. Мы не будем здесь проводить этого исследования. Ограничимся указанием того, что состояния с максимальным l ($l = n - 1$) соответствуют классическим круговым орбитам; это следует сравнивать с результатом старой квантовой теории, согласно которой эксцентриситет квантованных орбит равен $\sqrt{1 - l^2/n^2}$ и обращается в нуль, когда l принимает свое наибольшее значение (см. стр. 47).

Раздел II. КУЛОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ

§ 7. Кулоновская функция рассеяния

После отделения движения центра масс уравнение Шредингера задачи о рассеянии двух частиц, взаимодействующих по закону Кулона, записывается, следуя обозначениям § 1, в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (20)$$

где E — энергия в системе центра масс. Эффективное сечение рассеяния связывается с асимптотическим поведением собственных функций положительной энергии уравнения (20). Обозначим ¹⁾

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}, \quad (21)$$

$$\gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}; \quad (22)$$

тогда уравнение (20) записывается в форме

$$\left(\Delta + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (23)$$

Это уравнение обладает одним регулярным решением вида

$$e^{ikz} f(r - z). \quad (24)$$

¹⁾ Параметр γ аналогичен параметру ν из задачи об атоме водорода. Если положить $a = \hbar^2 / Z_1 Z_2 m e^2$, то получим $\gamma = 1/ka$ (см. уравнение (10)).

Действительно, если подставить это выражение в уравнение (23) и положить $u = r - z$, то получим дифференциальное уравнение

$$\left[u \frac{d^2}{du^2} + (1 - iku) \frac{d}{du} - \gamma k \right] f(u) = 0$$

или, полагая $v = iku = ik(r - z)$,

$$\left[v \frac{d^2}{dv^2} + (1 - v) \frac{d}{dv} + i\gamma \right] f(v) = 0.$$

Это уравнение типа Лапласа, решение которого, регулярное в начале, есть вырожденная гипергеометрическая функция $F(-i\gamma, 1; v)$. Таким образом, уравнение Шредингера действительно обладает регулярным решением в форме (24), а именно

$$\psi_c = Ae^{ikz} F(-i\gamma, 1; ik(r - z)), \quad (25)$$

где A — нормировочная постоянная.

Согласно исследованию, приведенному в дополнении Б, § 1, гипергеометрическая функция, фигурирующая в равенстве (25), является суммой двух функций, асимптотические формы которых при больших значениях $|v| = 2kr \sin^2 \frac{\theta}{2}$ даются уравнениями (Б.10) и (Б.11). Используем обозначения дополнения Б и положим

$$\psi_i = Ae^{ikz} W_1(-i\gamma, 1; iku), \quad (26)$$

$$\psi_d = Ae^{ikz} W_2(-i\gamma, 1; iku). \quad (27)$$

Тогда

$$\psi_c = \psi_i + \psi_d. \quad (28)$$

Функции ψ_i и ψ_d являются решениями (нерегулярными) уравнения (20). Выбирая

$$A = \Gamma(1 + i\gamma) e^{-\pi\gamma/2}, \quad (29)$$

находим следующие асимптотические формы для ψ_i и ψ_d :

$$\psi_i \underset{|r-z| \rightarrow \infty}{\sim} e^{i[kz + \gamma \ln k(r-z)]} \left[1 + \frac{\gamma^2}{ik(r-z)} + \dots \right], \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \psi_d \underset{|r-z| \rightarrow \infty}{\sim} & - \frac{\gamma}{k(r-z)} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} e^{i[kr - \gamma \ln k(r-z)]} \left[1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

Поскольку $z = r \cos \theta$, первый член асимптотического представления ψ_d можно записать в виде

$$\psi_d \underset{|r-z| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)]}{r} f_c(\theta), \quad (32)$$

где

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \cdot \exp \left[-i\gamma \ln \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right) + 2i\sigma_0 \right]; \quad (33)$$

здесь

$$\sigma_0 = \arg \Gamma(1 + i\gamma). \quad (34)$$

§ 8. Формула Резерфорда

Волновая функция ψ_c представляет стационарное состояние рассеяния для частицы с начальным импульсом $\hbar \mathbf{k}$, направленным вдоль оси Oz . Мы знаем, что в случае потенциала, стремящегося к нулю не медленнее $1/r^2$ при $r \rightarrow \infty$, аналогичное состояние рассеяния представляется волновой функцией с асимптотической формой

$$e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r},$$

которая интерпретируется как сумма падающей и рассеянной расходящейся волн. Волновая функция ψ_c также представляется в виде суммы двух членов ψ_i , ψ_d асимптотические формы которых похожи соответственно на плоскую и расходящуюся волны.

Однако даже на бесконечно больших расстояниях от начала координат функция ψ_i не может быть уподоблена плоской волне, ввиду присутствия фактора $\exp[i\gamma \ln k(r - z)]$; радиус действия кулоновского поля столь велик, что оно влияет на падающую волну даже в асимптотической области. Тем не менее, при очень больших отрицательных z функция ψ_i представляет волну с плотностью 1; причем соответствующая плотность потока

$$j_i = \frac{\hbar}{2im} [\psi_i^* (\nabla \psi_i) - \psi_i (\nabla \psi_i)^*]$$

направлена по оси Oz и равна $v \equiv \hbar k/m$ (логарифмический член дает поправки порядка $1/r$, которыми можно пренебречь). Это оправдывает истолкование ψ_i как падающей волны.

Аналогичным образом радиальная зависимость функции ψ_d при очень больших r выражается не формой $\exp(ikr)/r$, характерной для расходящихся волн, но более сложным выражением $\exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)]/r$. Однако в асимптотической области (кроме близкой окрестности полуоси положительных z , где разделение на падающую и рассеянную волны не имеет смысла) функцию ψ_d можно интерпретировать как рассеянную волну, так как вектор плотности потока $\mathbf{j}_d$, вычисленный с этой функцией, действительно направлен по радиусу в направлении возрастающих r , а влиянием фактора $\exp(-i\gamma \ln 2kr)$ можно пренебречь

в самом нижнем порядке по $1/r$; в этом приближении ψ_d есть волна с плотностью $|f_c(\theta)|^2/r^2$ и плотностью потока $v|f_c(\theta)|^2/r^2$.

Составляя отношение плотности рассеянного потока в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ и плотности падающего потока, получаем дифференциальное эффективное сечение рассеяния

$$\sigma_c(\Omega) = |f_c(\theta)|^2. \quad (35)$$

Эта формула аналогична формуле (X. 2), относящейся к рассеянию на потенциале более короткого радиуса действия. Конечно, вышеприведенные рассуждения могут быть подвергнуты той же критике, что и в § X. 3, однако, нетрудно провести и более строгое доказательство, подобное выводу §§ 4—6 гл. X.

Функция $f_c(\theta)$ называется амплитудой кулоновского рассеяния. В явном виде она дается выражением (33). Отсюда получаем формулу для эффективного сечения кулоновского рассеяния:

$$\sigma_c(\Omega) = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (36)$$

Полученное строгое выражение, как видим, тождественно классической формуле эффективного сечения кулоновского рассеяния, полученной в гл. VI (уравнение (VI. 29)): классическая формула Резерфорда остается верной, даже когда классическое приближение перестает быть справедливым. Это следует рассматривать как случайное совпадение.

Из формулы (36) находим следующие замечательные свойства эффективного сечения кулоновского рассеяния:

- а) оно зависит только от абсолютного значения потенциала, но не от его знака;
- б) угловое распределение не зависит от энергии;
- в) при заданном угле эффективное сечение при возрастании энергии падает как $1/E^2$;
- г) полное эффективное сечение бесконечно: интеграл $\int \sigma_c(\Omega) d\Omega$ расходится при малых углах.

Эта расходимость характерна для чисто кулоновского поля. На опыте такое поле не встречается никогда; так, при рассеянии заряженной частицы на атомном ядре кулоновское поле ядра на больших расстояниях нейтрализуется полем электронов оболочек и потенциал обращается в нуль на расстояниях, достаточно больших по сравнению с радиусом атома. Эффект экранирования приводит к модификации рассеянной волны при малых углах, так что дифференциальное эффективное сечение более не расходится при $\theta \rightarrow 0$. Можно показать, что указанное изменение волновой функции пренебрежимо мало при углах, превосходящих одновременно $2\gamma/ka$ и $1/ka$ (здесь a — радиус атома). При энергиях, обычно используемых в ядерной физике, эти предельные углы столь малы, что экранированием кулоновского поля можно полностью пренебречь.

§ 9. Разложение по парциальным волнам

Уравнение Шредингера (20) может быть решено методом разделения угловых и радиальных переменных. Этот метод не представляет большого интереса для чисто кулоновского рассеяния, так как мы обладаем более прямым методом. Кроме того, имея дело с потенциалом дальнего действия, мы заранее знаем, что разложение амплитуды рассеяния $f_c(\theta)$ по сферическим функциям будет плохо сходиться. Однако разложение по парциальным волнам оказывается полезным в таких задачах, когда к чисто кулоновскому взаимодействию добавляется некоторое взаимодействие с ограниченным радиусом, ибо присутствие этого дополнительного взаимодействия влияет только на первые члены разложения по сферическим гармоникам и, следовательно, разложение разности $f(\theta) - f_c(\theta)$ быстро сходится.

Разделение угловых и радиальных переменных уже было проведено для случая атома водорода. В наших новых обозначениях уравнение (4) записывается в форме

$$y_l'' + \left[k^2 - \frac{2\gamma k}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l = 0. \quad (37)$$

Чтобы построить решения этого уравнения, действуем как в задаче об атоме водорода, производя замену искомой функции и переменной:

$$y_l = e^{ikr} (kr)^{l+1} v_l, \\ \xi = -2ikr; \quad (38)$$

тогда v_l есть решение уравнения Лапласа (см. уравнение (12))

$$\left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (2l+2-\xi) \frac{d}{d\xi} - (l+1+i\gamma) \right] v_l = 0. \quad (39)$$

Известны асимптотические разложения (Б.10—11) двух нерегулярных решений этого уравнения $W_{1,2}(l+1+i\gamma, 2l+2; \xi)$. На их основе можно получить асимптотическую форму общего решения (39) и в результате короткого вычисления — асимптотическую форму общего решения (37): это линейная комбинация двух экспоненциальных функций

$$e^{\pm i(kr - \gamma \ln 2kr)}.$$

Мы знаем, что решение (39), регулярное в начале координат, есть гипергеометрическая функция $\Gamma(l+1+i\gamma, 2l+2; \xi)$; это сумма двух функций W_1 и W_2 (уравнение (Б.9)). Соответствующее решение уравнения (37) в асимптотической области пропорционально функции $\sin(kr - \gamma \ln 2kr - l\pi/2 + \sigma_l)$, где

$$\sigma_l = \arg \Gamma(l+1+i\gamma). \quad (40)$$

Величина σ_l называется *кулоновским фазовым сдвигом*. По определению регулярной кулоновской волновой функции $F_l(\gamma; kr)$ является регулярное решение уравнения (37) с асимптотической формой

$$F_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr - \gamma \ln 2kr - l\pi/2 + \sigma_l). \quad (41)$$

Согласно предыдущему

$$F_l(\gamma; kr) = c_l(\gamma) e^{ikr} (kr)^{l+1} F(l+1+i\gamma, 2l+2; -2ikr), \quad (42)$$

при этом постоянная $c_l(\gamma)$ должна быть выбрана так, чтобы F_l удовлетворяла условию (41), а именно

$$c_l = \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2} |\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}. \quad (43)$$

Вещественная функция F_l часто называется регулярной сферической кулоновской функцией; это функция kr , зависящая от параметра γ .

Можно определить также «нерегулярные сферические кулоновские функции». Это решения уравнения (37), нерегулярные в начале координат. Наиболее часто употребляемые функции определены в § Б.5. Укажем здесь только сходящуюся и расходящуюся волны $u_l^{(-)}$ и $u_l^{(+)}$ с асимптотическими формами

$$u_l^{(\pm)} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\pm i(kr - \gamma \ln 2kr - l\pi/2)}.$$

Эти функции являются комплексно сопряженными, причем

$$F_l = \text{Im } e^{i\sigma_l} u_l^{(+)}. \quad (44)$$

§ 10. Разложение ψ_c по сферическим функциям

Кулоновская волновая функция ψ_c , определенная в § 7,

$$\psi_c = e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} F(-i\gamma, 1; ik(r-z)), \quad (45)$$

может быть представлена в виде разложения в ряд по полиномам Лежандра:

$$\psi_c = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma; kr) P_l(\cos \theta). \quad (46)$$

Это разложение аналогично разложению плоской волны

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (47)$$

в которое оно переходит при $\gamma \rightarrow 0$,

Чтобы доказать соотношение (46), следует использовать интегральное представление (Б.6) гипергеометрической функции, фигурирующей в определении ψ_c , что дает

$$\begin{aligned}\psi_c &= \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1 - e^{-2\pi\gamma}) \Gamma(-i\gamma)} e^{ikz} \int_{\Gamma_0} e^{ik(r-z)t} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt = \\ &= \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1 - e^{-2\pi\gamma}) \Gamma(-i\gamma)} \int_{\Gamma_0} e^{ikrt} e^{ikz(1-t)} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt.\end{aligned}$$

Если разложить экспоненту $\exp[ikz(1-t)]$ в подынтегральном выражении в ряд по полиномам Лежандра по формуле (47) и изменить порядок суммирования и интегрирования, получим

$$\psi_c = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \varphi_l(r) P_l(\cos \theta), \quad (48)$$

где

$$\varphi_l(r) = \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1 - e^{-2\pi\gamma}) \Gamma(-i\gamma)} \int_{\Gamma_0} e^{ikrt} j_l[kr(1-t)] t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt. \quad (49)$$

С другой стороны, мы знаем, что

$$\xi j_l(\xi) = F_l(0; \xi) = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \xi^{l+1} e^{i\xi} F(l+1, 2l+2; -2i\xi),$$

откуда

$$j_l(\xi) = 2^l \xi^l e^{i\xi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!} \frac{(-2i\xi)^p}{p!}.$$

Подставляя это выражение для j_l в интеграл в правой части (49) и вновь меняя порядок суммирования и интегрирования, находим

$$\begin{aligned}\varphi_l(r) &= \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2}}{(1 - e^{-2\pi\gamma}) \Gamma(-i\gamma)} (kr)^l e^{ikr} \times \\ &\times \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!} \left(\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{l+p+i\gamma} dt \right) \frac{(-2ikr)^p}{p!}\end{aligned}$$

и поскольку, следуя (Б.5),

$$\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{l+p+i\gamma} dt = (1 - e^{-2\pi\gamma}) \frac{\Gamma(-i\gamma) \Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(l+p)!},$$

имеем

$$\begin{aligned}\varphi_l(r) &= 2^l e^{-\pi\gamma/2} (kr)^l e^{ikr} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(2l+1+p)!} \frac{(-2ikr)^p}{p!} = \\ &= 2^l e^{-\pi\gamma/2} \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{(2l+1)!} (kr)^l e^{ikr} F(l+1+i\gamma, 2l+2; -2ikr).\end{aligned}$$

При учете определений (40), (42) и (43) это дает

$$kr \varphi_l(r) = e^{i\sigma} {}_1F_l(\gamma; kr).$$

Искомое разложение получается при подстановке этого выражения в уравнение (48).

Можно было, впрочем, ожидать этого результата заранее. Действительно, поскольку ψ_c есть регулярное решение уравнения Шредингера (20), $\psi_i(r)$ необходимо есть регулярное решение радиального уравнения (37), т. е. пропорционально $F_l(\gamma; kr)$. Цель нашего вычисления состояла в определении констант пропорциональности.

Полезно выразить разложение (46) при помощи расходящихся и сходящихся кулоновских волновых функций. Подставляя вместо F_l ее выражение через функции $u_l^{(+)}$ и $u_l^{(-)}$ (уравнение (44)), находим

$$\psi_c = \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^{l+1} (u_l^{(-)} - e^{2i\sigma_l} u_l^{(+)}) P_l(\cos \theta). \quad (50)$$

§ 11. Модификация кулоновского потенциала короткодействующим взаимодействием

Когда к кулоновскому полю $V_c(r)$ добавляется некоторое короткодействующее взаимодействие $V'(r)$, стационарное состояние рассеяния более не представляется чисто кулоновской волновой функцией, но функцией ψ , разложение которой в ряд по полиномам Лежандра имеет вид

$$\psi = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \chi_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (51)$$

Метод фазовых сдвигов, позволяющий описывать рассеяние частицы потенциалом $V'(r)$, почти без изменений переносится на случай рассеяния потенциалом $V'(r) + V_c(r)$; следует только на каждом этапе вычислений заменить свободные волны на соответствующие кулоновские волновые функции.

Функция $\chi_l(r)$ является решением радиального уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} - \frac{2m}{\hbar^2} V'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l(r) = 0. \quad (52)$$

Можно показать (задача 2), что, если $V'(r)$ стремится к нулю в асимптотической области не медленнее $1/r^2$, то решения радиального уравнения асимптотически переходят в линейные комбинации экспонент $e^{\pm i(kr - \gamma \ln 2kr)}$ или, что то же самое, в линейные комбинации расходящихся и сходящихся кулоновских функций $u_l^{(+)}$ и $u_l^{(-)}$. В частности, регулярное решение этого уравнения асимптотически переходит в некоторую линейную комбинацию указанных двух функций. Пусть

$$A_l (u_l^{(-)} - e^{2i\delta_l} e^{2i\sigma_l} u_l^{(+)})$$

есть эта линейная комбинация (A_l — постоянная нормировки). Фазовый сдвиг δ_l характеризует действие потенциала $V'(r)$, добавленного к кулоновскому. Фазовый сдвиг δ_l равен нулю, если $V' = 0$, и в дальнейшем играет роль, совершенно аналогичную роли фазовых сдвигов при рассмотрении короткодействующих потенциалов.

Регулярное решение радиального уравнения χ_l должно быть выбрано так, чтобы функция ψ представляла стационарное состояние рассеяния; для этого необходимо, чтобы $\psi = \psi_c$ асимптотически вела себя как расходящаяся волна, т. е. как

$$e^{i(kr - \gamma \ln 2kr)/r}.$$

Это условие выполняется, если $A_l = i/2$ при всех значениях l , как это можно видеть, сравнивая (50) и (51). В асимптотической области, т. е. для значений r , достаточно больших, чтобы можно было полностью пренебречь потенциалом $V'(r)$, получаем разложение

$$\begin{aligned} \psi_{r \rightarrow \infty} &\sim \frac{1}{2kr} \sum_l (2l+1) i^{l+1} (u_l^{(-)} - e^{2i\delta_l} e^{2i\sigma_l} u_l^{(+)}) P_l(\cos \theta) \sim \\ &\sim \psi_c - \frac{1}{2kr} \sum_l (2l+1) i^{l+1} e^{2i\sigma_l} (e^{2i\delta_l} - 1) u_l^{(+)} P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (53)$$

Как и в § 7, можно представить ψ в виде суммы

$$\psi = \psi_i + \psi_d, \quad (54)$$

где ψ_i — функция, определенная уравнением (26) и представляющая падающую волну. Напротив, ψ_d отличается от функции (27), ее асимптотическая форма, после соответствующих вычислений, может быть представлена в виде

$$\psi_d \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{r} \exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)] \times f(\theta),$$

где

$$f(\theta) = f_c(\theta) + f'(\theta), \quad (55)$$

причем

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \exp\left[-i\gamma \ln\left(\sin^2 \frac{\theta}{2}\right) + 2i\sigma_0\right], \quad (55a)$$

$$f'(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) e^{2i\sigma_l} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (55b)$$

Нетрудно установить с помощью тех же аргументов, что и в § 8, что эффективное сечение рассеяния равно

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2. \quad (56)$$

Можно выразить его в виде суммы трех членов, воспользовавшись равенством (55)

$$\sigma(\Omega) = \sigma_c(\Omega) + 2 \operatorname{Re} f_c^* f' + |f'(\theta)|^2.$$

Многие характерные свойства обычных фазовых сдвигов при-сущи и фазовым сдвигам, введенным в этом параграфе. В частности, ряд (55б) сходится тем быстрее, чем короче радиус действия дополнительного потенциала V' . Формулы (X.39—44) из § X.10 остаются справедливыми, если только учесть, что функции $u_l^{(\pm)}$ представляют теперь не свободные волны, а волны кулоновские (задача 3). Однако численные значения величин τ_l , v_l , $q_l^{(\pm)}$ могут сильно отличаться от соответствующих значений для свободных волновых функций, так что результаты обсуждения поведения при малых энергиях, а также сходимости ряда должны быть пересмотрены. В частности, если мы имеем дело с отталкивающим кулоновским потенциалом, то фактор проникновения тем меньше, чем меньше начальная энергия, так что $v_l \ll 1$, каким бы ни было l , если только $E \leq Z_1 Z_2 e^2 / r_0$ (т. е. энергия меньше кулоновского барьера в точке r_0). За исключением этого все обсуждение резонансного рассеяния может быть повторено без изменения. При некотором изменении определений входящих величин (задача 4) формулы (X.72—73), исходные для приближения Борна, и формула (X.77), исходная для приближения «эффективного радиуса действия», остаются в силе.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пользуясь радиальным уравнением для атома водорода, доказать рекуррентное соотношение (соотношение Крамерса):

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1) a \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} [(2l+1)^2 - s^2] a^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0,$$

в котором $\langle r^s \rangle$ обозначает среднее значение r^s , когда атом находится в квантовом состоянии (nlm) ($a > -2l-3$). Вывести отсюда выражение для $\langle r^{-1} \rangle$, $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, приведенные в § Б.3. Это соотношение не позволяет найти $\langle r^{-2} \rangle$.

Показать, что во всяком стационарном состоянии водородоподобного атома среднее значение кинетической энергии равно с обратным знаком собственному значению энергии

$$E_n = -\langle p^2/2m \rangle_{nlm}.$$

2. Рассматривается рассеяние частицы с массой m центрально-симметричным потенциалом $V(r) = Ze^2/r + V'(r)$, где $V'(r)$ при $r \rightarrow \infty$ стремится к нулю не медленнее $1/r^2$. Показать, что решения радиального уравнения асим-

периодически переходят в линейные комбинации экспоненциальных функций $\exp [\pm i(kr - \gamma \ln 2kr)]$ ($k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $\gamma = Ze^2/\hbar v$; v и E — начальная скорость и энергия).

3. Показать, что формулы (X. 39—44) остаются верными, если к короткодействующему потенциалу прибавить член кулоновского взаимодействия $Z_1 Z_2 e^2/r$ (необходимо только изменить определение функций $u_l^{(+)}$ и $u_l^{(-)}$).

4. Как должны быть изменены интегральные представления (X. 72) и (X. 73), если рассеивающий потенциал есть сумма кулоновского и короткодействующего потенциалов? Тот же вопрос относительно формулы (X. 77). Рассмотреть теорию эффективного радиуса для s -рассеяния, когда короткодействующий потенциал обладает свойствами, указанными на стр. 391 (см. *H. A. Bethe, loc. cit.*, сноска X. 20).

§ 1. Введение

В классической механике гармонический осциллятор — это частица, способная перемещаться вдоль некоторой оси и подверженная действию возвращающей силы, пропорциональной расстоянию частицы от начала координат. Решение этой задачи хорошо известно. Пусть q — координата положения частицы на оси, p — её импульс, m — масса, $-m\omega^2 q$ — возвращающая сила. Уравнения движения частицы выводятся из функции Гамильтона $(p^2 + m^2\omega^2 q^2)/2m$; легко показать, что частица синусоидально колеблется с (круговой) частотой ω около начала координат.

Соответствующая квантовая задача формулируется как задача об одномерной частице с массой m и с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2\omega^2 q^2), \quad (1)$$

причем переменные положения q и импульса p связаны соотношением коммутации

$$[q, p] = i\hbar. \quad (2)$$

Здесь мы имеем дело с очень простой квантовой системой, уравнение Шредингера которой может быть точно решено; система обладает целым рядом замечательных свойств.

Исследование гармонического осциллятора имеет большое значение в квантовой теории, так как гамильтониан типа (1) встречается во всех задачах, где имеют место квантованные колебания: мы находим его в квантовой электродинамике и квантовой теории поля, в теории молекулярных и кристаллических колебаний. С другой стороны, проблемы, относящиеся к гармоническому осциллятору, служат прекрасной иллюстрацией основных принципов и формализма квантовой теории. Поэтому вполне оправдано подробное изучение этой задачи, которому и посвящена данная глава.

Два первых раздела посвящены одномерному осциллятору. Общее решение проблемы собственных значений гамильтониана содержится в разделе I. Раздел II посвящен различным прило-

жениям: нахождению производящей функции стационарных состояний, решению уравнений движения Гейзенберга, сравнению квантового и классического осцилляторов и изучению движения волнового пакета — что дает хорошую иллюстрацию как принципа соответствия, так и соотношений неопределенности — и, наконец, исследованию свойств ансамбля гармонических осцилляторов в термодинамическом равновесии.

В разделе III рассматривается гармонический осциллятор в нескольких измерениях. Основной характеристикой этой задачи является наличие вырожденных собственных значений. Следствия вырождения детально изучаются в двух частных случаях изотропного осциллятора в двух и трех измерениях.

Раздел I. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ВЕКТОРЫ ГАМИЛЬТониАНА

§ 2. Проблема собственных значений

Чтобы не загромождать вычисления ненужными постоянными, положим

$$\mathcal{H} = H\hbar\omega, \quad (3)$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} Q, \quad (4)$$

$$p = (m\hbar\omega)^{1/2} P. \quad (5)$$

Проблема состоит в нахождении собственных значений и построении собственных векторов оператора

$$H = \frac{1}{2} (P^2 + Q^2), \quad (6)$$

где эрмитовы операторы P и Q удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[Q, P] = i. \quad (7)$$

Чтобы решить эту задачу, можно выбрать некоторое представление, например, $\{Q\}$, и решить уравнение Шредингера в этом представлении. Поскольку в $\{Q\}$ -представлении P выражается дифференциальным оператором $(-id/dQ)$, мы приходим к одномерному уравнению Шредингера

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2 \right] u(Q) = \epsilon u(Q). \quad (8)$$

Мы воспользуемся более прямым методом, принадлежащим Дираку; построим собственные векторы H , действуя на один из них соответствующими операторами. Этот метод дает возможность решить задачу на собственные значения в общем виде

без ссылок на какое-либо конкретное представление, основываясь исключительно на основных постулатах пространства Гильберта и коммутационном соотношении (7). Его можно рассматривать как метод построения векторного пространства $\mathcal{E}$ динамических состояний системы, подобный описанному в § VIII.6.

§ 3. Введение операторов a , $a^\dagger$ и N

Определим операторы a и $a^\dagger$ формулами

$$a = \frac{\sqrt{2}}{2} (Q + iP), \quad (9a)$$

$$a^\dagger = \frac{\sqrt{2}}{2} (Q - iP), \quad (9b)$$

операторы a и $a^\dagger$ эрмитово сопряжены друг другу. Соотношение коммутации (7) эквивалентно соотношению

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (10)$$

Если в определении (6) выразить Q и P через a и $a^\dagger$, то получим

$$H = \frac{1}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a). \quad (11)$$

Положим

$$N = a^\dagger a, \quad (12)$$

тогда из (10) и (11) находим

$$H = N + 1/2. \quad (13)$$

Из уравнений (10) и (12) получаем важные соотношения:

$$Na = a(N - 1), \quad (14a)$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \quad (14b)$$

Задача на собственные значения, которую мы решаем, эквивалентна задаче построения собственных векторов оператора N , определенного формулой (12), причем операторы a и $a^\dagger$ эрмитово сопряжены друг другу и удовлетворяют условию (10).

Докажем основную теорему.

Если $|\nu\rangle$ есть собственный вектор оператора N , а ν — соответствующее собственное значение, то

а) $\nu \geq 0$;

б) если $\nu = 0$, то $a|\nu\rangle = 0$, в остальных же случаях $a|\nu\rangle$ есть отличный от нуля вектор с нормой

$$\nu \langle \nu | \nu \rangle,$$

причем это собственный вектор оператора N , принадлежащий собственному значению $\nu - 1$;

в) вектор $a^{\dagger}|\nu\rangle$ отличен от нуля, его норма равна

$$(\nu + 1)\langle \nu | \nu \rangle,$$

причем это собственный вектор оператора N , принадлежащий собственному значению $\nu + 1$.

По предположению

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \quad \langle \nu | \nu \rangle > 0.$$

Пользуясь определением (12) и коммутационным соотношением (10), находим нормы векторов $a|\nu\rangle$ и $a^{\dagger}|\nu\rangle$:

$$\langle \nu | a^{\dagger}a |\nu\rangle = \langle \nu | N |\nu\rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle, \quad (15a)$$

$$\langle \nu | aa^{\dagger} |\nu\rangle = \langle \nu | (N + 1) |\nu\rangle = (\nu + 1) \langle \nu | \nu \rangle. \quad (15b)$$

Однако, норма вектора в пространстве Гильберта либо положительна, либо равна нулю, причем равенство нулю нормы является необходимым и достаточным условием равенства нулю вектора. Чтобы этот основной постулат выполнялся в нашем случае, необходимо и достаточно, чтобы $\nu \geq 0$ (свойство а))¹⁾. Условие равенства нулю вектора $a|\nu\rangle$ есть частный случай уравнения (15a). С другой стороны, векторы $a|\nu\rangle$ и $a^{\dagger}|\nu\rangle$ действительно удовлетворяют уравнениям на собственные значения теоремы, так как, согласно (14a) и (14b),

$$Na|\nu\rangle = a(N - 1)|\nu\rangle = (\nu - 1)a|\nu\rangle,$$

$$Na^{\dagger}|\nu\rangle = a^{\dagger}(N + 1)|\nu\rangle = (\nu + 1)a^{\dagger}|\nu\rangle,$$

что и требовалось доказать.

§ 4. Спектр и базисная система оператора N

Если $\nu > 0$, то предшествующая теорема применима и к вектору $a|\nu\rangle$, принадлежащему собственному значению $\nu - 1$. Это убеждает нас в том, что $\nu \geq 1$. Если $\nu > 1$, то теорема применима также к вектору $a^2|\nu\rangle$. Так мы образуем последовательность собственных векторов

$$a|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \dots, a^p|\nu\rangle, \dots,$$

принадлежащих собственным значениям

$$\nu - 1, \nu - 2, \dots, \nu - p, \dots$$

¹⁾ См. задачу VII.9.

Эта последовательность обязательно конечна, так как собственные значения N ограничены снизу нулем. Иначе говоря, векторы последовательности все равны нулю, начиная с некоторого $n+1$: действие a на собственный отличный от нуля вектор $a^n|v\rangle$, принадлежащий собственному значению $v-n$, дает 0; согласно в) это значит, что $v=n$.

Аналогичным образом можно применить нашу теорему к вектору $a^+|v\rangle$, который очевидно не равен нулю и принадлежит собственному значению $(v+1)$, затем к вектору $a^{+2}|v\rangle$ и т. д. Так получается неограниченная последовательность отличных от нуля векторов

$$a^+|v\rangle, a^{+2}|v\rangle, \dots, a^{+p}|v\rangle, \dots,$$

которые являются собственными векторами N , принадлежащими соответственно собственным значениям

$$v+1, v+2, \dots, v+p, \dots$$

Приходим к заключению, что спектр собственных значений оператора N образован последовательностью целых неотрицательных чисел. Последовательность собственных векторов, принадлежащих каждому одному из значений спектра, получается повторным действием операторов a или a^+ на один из этих векторов. Отношение норм двух соседних векторов дается соотношениями (15а) или (15б). Это множество векторов образует полную систему. Действительно, можно показать, что всякая функция от a и a^+ , коммутирующая с N , является функцией N (задача 1). Поэтому оператор N образует сам по себе полный набор коммутирующих наблюдаемых и ни одно из его собственных значений не может быть вырождено.

Построенные нами векторы не являются нормированными на единицу. Но чтобы получить ортонормированный базис наблюдаемой N , достаточно умножить каждый вектор на соответствующую постоянную, которую следует выбрать, исходя из соотношений (15а) и (15б). Требование нормировки определяет указанную постоянную только с точностью до фазы, которую мы еще можем выбрать так, чтобы максимально упростить получающиеся формулы. В результате находим последовательность ортонормированных векторов

$$|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, \quad (16)$$

принадлежащих, соответственно, следующим собственным значениям N :

$$0, 1, \dots, n, \dots$$

Векторы связаны друг с другом рекуррентными соотношениями:

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (17)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle (n \neq 0), \quad (18)$$

$$a |0\rangle = 0. \quad (19)$$

Нетрудно проверить, что все они получаются из вектора $|0\rangle$ согласно формуле

$$|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (20)$$

удовлетворяют уравнению на собственные значения

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad (21)$$

и нормированы на единицу, т. е. удовлетворяют соотношениям

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}. \quad (22)$$

Поскольку оператор N сам по себе составляет полный набор, последовательность векторов (16) образует полную систему векторов пространства динамических состояний изучаемой квантовой системы $\mathcal{E}$. Остается проверить внутреннюю согласованность нашего построения $\mathcal{E}$, а именно, убедиться, что векторы из $\mathcal{E}$ удовлетворяют всем требованиям, предъявляемым к векторам пространства Гильберта, а физические величины представлены наблюдаемыми, которые подчиняются правилам соответствующей алгебры. Мы не будем заниматься здесь этими тонкостями (задача 3).

§ 5. Представление $\{N\}$

Векторы последовательности (16) образуют базисную систему некоторого представления, которое будем называть представлением $\{N\}$. Из уравнений (17), (18), (19) и (21) нетрудно получить матрицы, соответствующие в этом представлении операторам N , a и a^+ . Если условиться располагать строки и столбцы этих матриц по порядку возрастающих квантовых чисел n (верхняя строка соответствует $n=0$, следующая строка — $n=1$ и т. д.; левый столбец соответствует $n=0$, следующий столбец — $n=1$ и т. д.), то для оператора N получим диагональную матрицу

$$N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 1 & 0 & . & . & . \\ . & 0 & 2 & 0 & . & . \\ . & . & 0 & 3 & 0 & . \\ . & . & . & 0 & . & . \\ . & . & . & . & . & . \end{bmatrix},$$

для оператора a — вещественную матрицу

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix},$$

где отличные от нуля элементы располагаются на диагонали, ближайшей сверху по отношению к главной диагонали, а для оператора $a^\dagger$ — эрмитово сопряженную матрицу

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ \vdots & \vdots & \sqrt{4} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

где отличные от нуля элементы располагаются на диагонали, ближайшей снизу по отношению к главной. Ввиду того, что наблюдаемые квантовой системы выражаются как функции a и $a^\dagger$, нетрудно построить матрицы, соответствующие им в представлении $\{N\}$. В частности, имеем

$$\mathcal{H} = (N + 1/2) \hbar \omega, \quad (23)$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (a^\dagger + a), \quad (24)$$

$$p = i \left(\frac{m\hbar\omega}{2} \right)^{1/2} (a^\dagger - a). \quad (25)$$

Оператор $\mathcal{H}$ диагонален в этом представлении, и его собственные значения равны

$$(n + 1/2) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots, \infty);$$

наблюдаемые q и p выражаются как линейные функции a и $a^\dagger$, так что отличные от нуля элементы представляющих их матриц располагаются на двух диагоналях, соседних с главной диагональю. Читатель сам без труда построит эти матрицы.

§ 6. Операторы рождения и уничтожения

Операторы N , a и $a^\dagger$ были введены для упрощения решения задачи на собственные значения. Если оператор $\mathcal{H}$ является гамильтонианом одной частицы в одном измерении, то эти операторы не имеют непосредственного физического смысла.

Однако задача на собственные значения $\mathcal{H}$ допускает и другую интерпретацию. Ввиду того, что уровни энергии эквидистантны с промежутком $\hbar\omega$, можно рассматривать $\mathcal{H}$ как гамильтониан системы тождественных частиц, находящихся в одном энергетическом состоянии $\hbar\omega$, число которых N может изменяться, так что каждое собственное состояние $\mathcal{H}$ соответствует определенному значению N и, следовательно, определенному значению полной энергии. Тогда вектор $|n\rangle$ представляет состояние, в котором присутствует n частиц: вектор $|0\rangle$ представляет состояние без частиц (вакуум). При переходе от состояния $|n\rangle$ к состоянию $|n+1\rangle$ число частиц увеличивается на единицу, а полная энергия системы возрастает на величину $\hbar\omega$. Замечаем, однако, что энергия пустого состояния равна не нулю, а величине $\hbar\omega/2$; этой аномалии можно избежать, если в качестве оператора энергии системы взять не $\mathcal{H}$, но $\mathcal{H} - \hbar\omega/2$.

Согласно этой интерпретации, оператор N представляет число частиц, и его собственные значения суть целые числа от 0 до $+\infty$. Оператор $a^\dagger$ преобразует состояние с n частицами в состояние с $(n+1)$ частицей: $a^\dagger$ есть *оператор рождения*. Оператор a наоборот уменьшает на единицу число присутствующих частиц: a есть *оператор уничтожения*.

Подобная интерпретация гармонического осциллятора широко используется в квантовой теории поля и в теории кристаллических и молекулярных колебаний. Электромагнитное поле, например, может быть представлено в виде суперпозиции плоских волн, характеризуемых вектором поляризации ϵ и волновым вектором k , соответствующая частота равна $\omega = k/c$. Классически интенсивность каждой составляющей может изменяться непрерывно, но в квантовой теории эти изменения происходят скачкообразно целыми световыми квантами или фотонами с энергией $\hbar\omega$. Гамильтониан квантового электромагнитного поля выражается совокупностью членов, относящихся к фотонам определенного типа, который характеризуется ϵ и k (пусть индекс s обозначает комбинированный индекс (ϵ, k)):

$$H = \sum_s \mathcal{H}_s.$$

Каждый парциальный гамильтониан может быть записан в форме

$$\mathcal{H}_s = \hbar\omega_s a_s^\dagger a_s.$$

Операторы a_s и $a_s^\dagger$ эрмитово сопряжены друг другу и удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[a_s, a_{s'}^\dagger] = \delta_{ss'},$$

которые являются простым обобщением соотношения (10). При этом операторы $a_s^\dagger$ и a_s интерпретируются соответственно, как операторы рождения и уничтожения фотона типа s (см. гл. XXI, т. II).

§ 7. Представление $\{Q\}$. Полиномы Эрмита

На языке волновой механики задача на собственные значения оператора $\mathcal{H}$ сводится к нахождению значений E , при которых уравнение

$$\mathcal{H}\psi(q) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \right) \psi(q) = E\psi(q)$$

обладает решением, регулярным на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$. Если воспользоваться в этой задаче рассуждениями гл. III (§ 10), то можно констатировать, что значение E , удовлетворяющие указанному выше условию, образуют дискретный спектр, причем каждому из значений E соответствует одно и только одно решение (определяемое с точностью до постоянного множителя); это решение имеет ограниченную норму. Этот результат вполне согласуется с выводами предшествующего параграфа о том, что спектр оператора полностью дискретен и невырожден. Решая задачу на собственные значения в указанной выше постановке, мы найдем вновь последовательность собственных значений оператора $\mathcal{H}$:

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

Принадлежащие этим значениям собственные функции $\psi_n(q) \equiv \langle q|n \rangle$ описывают собственные состояния $|n\rangle$ в представлении $\{q\}$.

В дальнейшем мы воспользуемся представлением $\{Q\}$, которое получается из $\{q\}$ заменой переменных (4). Собственные функции $u_n(Q)$ и $\psi_n(q)$, относящиеся к одному собственному состоянию $|n\rangle$ в представлениях $\{Q\}$ и $\{q\}$ соответственно связаны соотношением

$$\langle Q|n \rangle \equiv u_n(Q) = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/4} \psi_n(q).$$

Уравнение (8) является уравнением Шредингера в представлении $\{Q\}$ (с точностью до множителя $\hbar\omega$).

Собственные функции $u_0(Q)$, $u_1(Q)$, ..., $u_n(Q)$, ... получаются без труда с помощью соотношений (17—19). Собственная функция основного состояния удовлетворяет уравнению (19), т. е.

$$\left[\frac{d}{dQ} + Q \right] u_0(Q) = 0.$$

Нормированное на единицу решение этого уравнения имеет вид

$$u_0(Q) = \pi^{-1/4} e^{-Q^2/2}. \quad (26)$$

Из (17) и (18) можно получить соотношения, связывающие нормированные собственные функции, принадлежащие соседним собственным значениям (см. дополнение Б, раздел III). В частности, повторное применение (17) позволяет построить все собственные функции, исходя из функции u_0 . Вместо (17) удобнее использовать соотношение (20), которое полностью эквивалентно ему, что дает

$$u_n(Q) = [\sqrt{\pi} 2^n n!]^{-1/2} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-Q^2/2}. \quad (27)$$

Пользуясь операторным тождеством

$$\left(Q - \frac{d}{dQ}\right) \equiv \left(-e^{Q^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-Q^2/2}\right),$$

можно переписать уравнение (27) в форме (Б.70), где $H_n(Q)$ — полином Эрмита порядка n в соответствии с определением (Б.59). Таким образом, получаем, что $u_n(Q)$ выражается как произведение $\exp(-Q^2/2)$ на полином степени n и четности $(-1)^n$. Главные свойства этих полиномов указаны в дополнении Б, § 7.

Раздел II. ПРИЛОЖЕНИЯ И РАЗЛИЧНЫЕ СВОЙСТВА

§ 8. Производящая функция собственных функций $u_n(Q)$

В качестве примера приложения результатов теории найдем производящую функцию собственных функций $u_n(Q)$, т. е. функцию

$$F(t, Q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(Q) t^n,$$

где c_n — соответствующие постоянные нормировки. Ввиду того что $u_n(Q)$ представляет вектор $(n!)^{-1/2} a^{+n} |0\rangle$ (уравнение (20)), функция $F(t, Q)$ представляет вектор

$$\sum_n \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (a^+ t)^n |0\rangle.$$

Если выбрать

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}},$$

то $F(t, Q)$ будет представлять вектор $\exp(a^+ t) |0\rangle$

$$F(t, Q) = \langle Q | e^{a^+ t} | 0 \rangle. \quad (28)$$

Для вычисления последнего выражения воспользуемся следующей леммой.

Лемма. Если коммутатор двух операторов A и B коммутирует с каждым из них

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0,$$

то имеет место тождество

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}. \quad (29)$$

Приводимое нами доказательство принадлежит Глауберу. Рассмотрим оператор, зависящий от параметра x

$$f(x) = e^{Ax} e^{Bx}.$$

Имеем

$$\frac{df}{dx} = A e^{Ax} e^{Bx} + e^{Ax} B e^{Bx} = (A + e^{Ax} B e^{-Ax}) f(x).$$

Но поскольку $[B, A]$ коммутирует с A :

$$[B, A^n] = n A^{n-1} [B, A],$$

$$[B, e^{-Ax}] = \sum_n \frac{(-x)^n}{n!} [B, A^n] = \sum_n \frac{(-x)^n}{(n-1)!} A^{n-1} [B, A] = -e^{-Ax} [B, A] x.$$

Следовательно (см задачу VIII. 4),

$$e^{Ax} B e^{-Ax} = B - [B, A] x,$$

так что

$$\frac{df}{dx} = (A + B + [A, B] x) f(x).$$

Оператор $f(x)$ является решением этого дифференциального уравнения, причем $f(0) = 1$. Поскольку операторы $A + B$ и $[B, A]$ коммутируют, они могут рассматриваться здесь согласно обычным правилам алгебры. Дифференциальное уравнение интегрируется без труда и дает

$$f(x) = e^{(A+B)x} e^{\frac{1}{2}[A, B]x^2}$$

Тождество (29) следует, если положить $x = 1$

Взяв $A = Q\hbar/\sqrt{2}$, $B = -iP\hbar/\sqrt{2}$, $[A, B] = \hbar^2/2$, применим тождество (29) к оператору $\exp(a^\dagger t)$, тогда

$$\exp(a^\dagger t) = \exp(Q\hbar/\sqrt{2}) \exp(-iP\hbar/\sqrt{2}) \exp(-\hbar^2/4),$$

Переноса это выражение в уравнение (28), получаем

$$F(t, Q) = e^{-\hbar^2/4} e^{Q\hbar/\sqrt{2}} \langle Q | e^{-iP\hbar/\sqrt{2}} | 0 \rangle.$$

Но

$$\langle Q | e^{-iP\hbar/\sqrt{2}} | 0 \rangle = e^{-\frac{t}{\sqrt{2}} \cdot \frac{d}{dQ}} u_0(Q) = u_0\left(Q - \frac{t}{\sqrt{2}}\right).$$

Воспользовавшись выражением (26) для u_n , после вычислений получим

$$F(t, Q) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u_n(Q)}{\sqrt{n!}} t^n = \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{Q^2}{2} + iQ\sqrt{2} - \frac{t^2}{2}\right). \quad (30)$$

§ 9. Интегрирование уравнений Гейзенберга

Рассмотрим гармонический осциллятор в «представлении» Гейзенберга. Все операторы в этом параграфе будут операторами в «представлении» Гейзенберга, поэтому опустим индекс H , который мы использовали в гл. VIII. Все операторы изменяются во времени. Индексом «0» будем отмечать их значения в момент времени $t = 0$.

Учитывая уравнение (23) и соотношения (14), можно записать уравнения Гейзенберга для операторов a и $a^\dagger$:

$$i\hbar \frac{da}{dt} = [a, \mathcal{H}] = \hbar\omega a, \quad i\hbar \frac{da^\dagger}{dt} = [a^\dagger, \mathcal{H}] = -\hbar\omega a^\dagger.$$

Уравнения интегрируются без труда, что дает

$$a(t) = a_0 e^{-i\omega t}, \quad (31a)$$

$$a^\dagger(t) = a_0^\dagger e^{i\omega t}. \quad (31b)$$

Используя соотношения (24) и (25), выражающие q и p через a и $a^\dagger$, находим

$$q(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a_0^\dagger e^{i\omega t} + a_0 e^{-i\omega t}), \quad (32)$$

$$p(t) = i \left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2} (a_0^\dagger e^{i\omega t} - a_0 e^{-i\omega t}). \quad (33)$$

Наконец, выражая a_0 и $a_0^\dagger$ через начальную координату q_0 и начальный импульс p_0 , получаем

$$q(t) = q_0 \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} p_0 \sin \omega t, \quad (34)$$

$$p(t) = p_0 \cos \omega t - m\omega q_0 \sin \omega t. \quad (35)$$

В этих операторных уравнениях появляются те же самые тригонометрические функции, что и в случае классического гармонического осциллятора. В частности, средние значения $\langle q \rangle_t$, $\langle p \rangle_t$ подчиняются классическим законам движения:

$$\langle q \rangle_t = \langle q \rangle_0 \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \langle p \rangle_0 \sin \omega t, \quad (36)$$

$$\langle p \rangle_t = \langle p \rangle_0 \cos \omega t - m\omega \langle q \rangle_0 \sin \omega t. \quad (37)$$

Это свойство гармонического осциллятора уже отмечалось в гл. VI.

§ 10. Классический и квантовый осцилляторы

В целях иллюстрации соответствия между классической и квантовой механиками сравним в этом и следующем параграфах законы движения классического и квантового осцилляторов.

Общее решение уравнений движения классического гармонического осциллятора можно записать в виде:

$$q_{\text{кл}} = A \sin(\omega t + \varphi), \quad p_{\text{кл}} = m\omega A \cos(\omega t + \varphi).$$

Это чисто синусоидальное колебательное движение с (круговой) частотой ω . Закон движения зависит от двух параметров A и φ . Энергия осциллятора связана с амплитудой колебания A соотношением

$$E_{\text{кл}} = \frac{m\omega^2 A^2}{2}. \quad (38)$$

Если фиксировать энергию $E_{\text{кл}}$, то различные возможные движения отличаются фазовым сдвигом φ .

Пусть $F_{\text{кл}}$ — некоторая динамическая переменная системы. Будучи функцией $q_{\text{кл}}$ и $p_{\text{кл}}$ она периодически (но не обязательно синусоидально) изменяется во времени с частотой ω . Закон изменения $F_{\text{кл}}$ для двух возможных движений с одной и той же энергией одинаков с точностью до фазового сдвига. Среднее $\bar{F}_{\text{кл}}$, взятое по всем возможным движениям с одинаковой энергией (микроканонический ансамбль), получается путем усреднения по сдвигам фаз; $\bar{F}_{\text{кл}}$ не зависит от времени и равно среднему по периоду $2\pi/\omega$ от значений, принимаемых $F_{\text{кл}}$ в течение одного периода. В частности, находим

$$\bar{q}_{\text{кл}} = \bar{p}_{\text{кл}} = 0, \quad (39)$$

$$\bar{q}_{\text{кл}}^2 = \frac{A^2}{2} = \frac{E_{\text{кл}}}{m\omega^2}, \quad (40)$$

$$\bar{p}_{\text{кл}}^2 = m^2\omega^2\bar{q}_{\text{кл}}^2 = mE_{\text{кл}} \quad (41)$$

(средняя кинетическая и средняя потенциальная энергия осциллятора равны друг другу).

Сравним эти результаты с поведением квантового осциллятора в стационарном состоянии. В состоянии $|n\rangle$ квантовый осциллятор имеет определенную и постоянную во времени энергию: $(n + 1/2)\hbar\omega = E_n$. Напротив, наблюдаемые положения q и импульса p не имеют определенных значений; можно только определить статистическое распределение результатов измерения той или иной из этих величин. Поскольку состояние стационарно, эти статистические распределения постоянны во времени. В частности, средние значения q и p равны соответствующим диагональным элементам матриц представления $\{N\}$:

$$\langle n | q | n \rangle = \langle n | p | n \rangle = 0. \quad (42)$$

Средние значения q^2 и p^2 вычисляются без труда, если выразить эти операторы через a и $a^\dagger$ (уравнения (24)–(25)) и использовать соотношения (17–19). Получаем

$$\langle n | q^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (a^\dagger a + a a^\dagger) | n \rangle = \frac{E_n}{m\omega^2}, \quad (43)$$

$$\langle n | p^2 | n \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | (a^\dagger a + a a^\dagger) | n \rangle = mE_n. \quad (44)$$

Принцип соответствия требует (см. задачу 4), чтобы в пределе $n \rightarrow \infty$ выражения для средних значений (42)–(44) переходили соответственно в классические выражения (39)–(41) для того же значения энергии ($E_n = E_{\text{кл}}$). Тот факт, что искомое равенство осуществляется при любых значениях n , является свойством, характерным именно для гармонического осциллятора.

Заметим, между прочим, что в состоянии $|n\rangle$

$$\Delta p \cdot \Delta q = E_n/\omega = (n + 1/2) \hbar \quad (45)$$

в согласии с соотношениями неопределенности координата-импульс.

§ 11. Движение минимизирующего волнового пакета и классический предел

Рассмотрим волновой пакет в одном измерении:

$$f(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle q - \frac{m\omega}{2\hbar} (q - \langle q \rangle)^2 \right]. \quad (46)$$

Это минимизирующий волновой пакет (задача IV.4): он представляет частицу, локализованную в конфигурационном пространстве около среднего положения $\langle q \rangle$ со среднеквадратичным отклонением $\Delta q = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ и локализованную в пространстве импульсов около среднего значения $\langle p \rangle$ со среднеквадратичным отклонением $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$.

Если движение частицы определяется гамильтонианом $\mathcal{H}$, то можно показать (задача 6), что волновой пакет остается минимизирующим и осциллирует с частотой ω . Точнее говоря, статистическое распределение $\rho(q, t)$ величины q изменяется по закону

$$\rho(q, t) \equiv |f(q, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m\omega}{\hbar} (q - \langle q \rangle_t)^2 \right].$$

Следовательно, оно осциллирует, не деформируясь, причем центр распределения $\langle q \rangle_t$ осуществляет гармоническое движение, предсказываемое классической теорией. Статистическое распределение ρ ведет себя аналогичным образом.

В противоположность этому статистическое распределение наблюдаемой $\mathcal{H}$ остается постоянным во времени. Вероятность найти систему в состоянии с энергией $(n + 1/2)\hbar\omega$ в каждый момент времени равна (задача 6):

$$\frac{1}{n!} \left(\frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega} \right)^n e^{-\frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega}},$$

где использовано обозначение

$$E_{\text{кл}} = \frac{1}{2m} (\langle p \rangle^2 + m^2 \omega^2 \langle q \rangle^2).$$

Закон распределения вероятностей позволяет найти среднее значение энергии

$$\langle E \rangle = e^{-\frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \frac{1}{n!} \left(\frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega} \right)^n = E_{\text{кл}} + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (47)$$

и среднее квадратичное отклонение

$$\Delta E = \sqrt{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2} = \sqrt{\hbar\omega E_{\text{кл}}}. \quad (48)$$

Рассматриваемый волновой пакет хорошо иллюстрирует соотношения неопределенности. Он выбран таким образом, что произведение неопределенностей $\Delta p \cdot \Delta q$ постоянно равно своему минимальному значению $\hbar/2$.

Что же касается соотношения время-энергия, то ΔE можно сравнить с промежутком времени τ_q , характеризующим ритм эволюции статистического распределения q . Пусть τ_q есть время, необходимое для того, чтобы центр распределения $\langle q \rangle_t$ сместился на ширину распределения Δq . Поскольку скорость центра пакета равна $\langle p \rangle_t / m$, имеем

$$\tau_q = \frac{m}{\langle p \rangle_t} \Delta q = \frac{1}{\langle p \rangle_t} \left(\frac{\hbar m}{2\omega} \right)^{1/2}.$$

Величина τ_q периодически проходит через минимум, когда $\langle p_t \rangle$ достигает своего наибольшего значения $\sqrt{2mE_{\text{кл}}}$. В этом случае имеем

$$\tau_{q\text{min}} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\hbar\omega E_{\text{кл}}} \right)^{1/2}.$$

Используя (48), получим

$$\tau_{q\text{min}} \cdot \Delta E = \hbar/2 \quad (49)$$

в согласии с соотношением (VIII. 47) неопределенности время-энергия.

Амплитуда A колебаний центра волнового пакета выражается классическим соотношением (38)

$$A = \left(\frac{2E_{\text{кл}}}{m\omega^2} \right)^{1/2}.$$

В пределе, когда эта амплитуда велика по сравнению с протяженностью пакета $(\hbar/2m\omega)^{1/2}$ и в той мере, в какой можно пренебречь длинами порядка $(\hbar/2m\omega)^{1/2}$, классический образ точечной частицы, осциллирующей по закону $\langle q \rangle$, дает удовлетворительное описание явления. Этот предел является пределом достаточно больших квантовых чисел в согласии с общим принципом соответствия. Действительно, он реализуется при $E_{\text{кл}} \gg \hbar\omega$, но число квантованных уровней энергии, дающих заметный вклад при образовании волнового пакета, по порядку величины равно отношению ΔE к расстоянию между уровнями, т. е.

$$\frac{\Delta E}{\hbar\omega} = \left(\frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega} \right)^{1/2} \gg 1.$$

Конечно, указанный классический образ предполагает также, что дисперсия по импульсам $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$ и дисперсия по энергии $\Delta E = (\hbar\omega E_{\text{кл}})^{1/2}$ рассматриваются как пренебрежимо малые величины.

Что касается энергии, то с указанной выше точностью $\langle E \rangle \approx E_{\text{кл}}$; действительно

$$\langle E \rangle - E_{\text{кл}} = \hbar\omega/2 \ll \Delta E.$$

Поэтому мы можем приписать системе энергию $E_{\text{кл}}$ соответствующей классической частицы.

§ 12. Гармонические осцилляторы в термодинамическом равновесии

Рассмотрим гармонический осциллятор, находящийся в термодинамическом равновесии с термостатом при температуре T . Его динамическое состояние является смешанным и согласно закону Больцмана описывается матрицей плотности

$$\rho = \frac{e^{-\mathcal{H}/kT}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}/kT}}. \quad (50)$$

Изучим свойства такого смешанного состояния.

Вычислим сначала *статистическую сумму*

$$Z(\mu) = \text{Sp } e^{-\mu\mathcal{H}}.$$

Вычисление следа легко производится в представлении, где диагональна наблюдаемая $\mathcal{H}$:

$$Z(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\mu(n+1/2)\hbar\omega} = e^{-\mu\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\mu\hbar\omega})^n,$$

откуда, суммируя геометрическую прогрессию в правой части уравнения, находим

$$Z(\mu) = \frac{e^{-\mu\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\mu\hbar\omega}}. \quad (51)$$

Средняя энергия

$$\langle E \rangle = \text{Sp } \rho \mathcal{H}$$

получается из статистической суммы с учетом уравнения (VIII.84). Имеем

$$\ln Z = -\frac{\mu\hbar\omega}{2} - \ln(1 - e^{-\mu\hbar\omega}),$$

откуда

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \Big|_{\mu=1/kT} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (52)$$

Следовательно, для средней энергии квантового осциллятора получаем формулу Планка (с точностью до слагаемого $\hbar\omega/2$).

При очень низких температурах ($kT \ll \hbar\omega$) осциллятор почти с полной достоверностью находится в своем основном состоянии

$$\langle E \rangle \approx \hbar\omega/2.$$

При очень высоких температурах ($kT \gg \hbar\omega$) средняя энергия стремится к значению, определяемому классической статистикой Максвелла — Больцмана:

$$\langle E \rangle \approx kT.$$

В качестве важного свойства квантового осциллятора в термодинамическом равновесии отметим следующую теорему Блоха.

Теорема. *Распределение вероятности заданной комбинации $\alpha q + \beta p$ координаты и импульса выражается законом Гаусса.*

Чтобы доказать эту теорему, вычислим характеристическую функцию $\varphi(\xi)$ этого распределения. Функция $\varphi(\xi)$, по определению, есть среднее значение $\exp[i\xi(\alpha q + \beta p)]$:

$$\varphi(\xi) = \text{Sp } \rho e^{i\xi(\alpha q + \beta p)}. \quad (53)$$

Вычислим этот след в представлении $\{N\}$, где оператор ρ диагонален.

Найдем сначала величины

$$g_n(\xi) = \langle n | e^{i\xi(\alpha q + \beta p)} | n \rangle. \quad (54)$$

Имеем, учитывая (24—25),

$$\alpha q + \beta p = \gamma a + \gamma^* a^\dagger,$$

где

$$\gamma = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (\alpha - im\omega\beta).$$

Согласно тождеству (29)

$$e^{i\xi(\alpha q + \beta p)} = e^{i\xi(\gamma a + \gamma^* a^\dagger)} = e^{\xi^2 \gamma \gamma^* / 2} e^{i\xi \gamma a} e^{i\xi \gamma^* a^\dagger},$$

откуда

$$g_n(\xi) = e^{\xi^2 \gamma \gamma^* / 2} \langle n | e^{i\xi \gamma a} e^{i\xi \gamma^* a^\dagger} | n \rangle.$$

Разлагая в ряд экспоненты и учитывая соотношение (20), получаем

$$e^{i\xi \gamma^* a^\dagger} | n \rangle = \sum_{t=0}^{\infty} \left(\frac{(n+t)!}{n!} \right)^{1/2} \cdot \frac{(i\xi \gamma^*)^t}{t!} | n+t \rangle,$$

$$\langle n | e^{i\xi \gamma a} = \sum_{s=0}^{\infty} \left(\frac{(n+s)!}{n!} \right)^{1/2} \cdot \frac{(i\xi \gamma)^s}{s!} \langle n+s |.$$

В скалярном произведении этих двух векторов недиагональные члены ($s \neq t$) двойной суммы все равны нулю по условиям ортогональности, так что остается

$$g_n(\xi) = e^{\xi^2 \gamma \gamma^* / 2} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-\xi^2 \gamma \gamma^*)^s}{(s!)^2} \cdot \frac{(n+s)!}{n!}. \quad (55)$$

Обозначим

$$x = -\xi^2 \gamma \gamma^*, \quad y = e^{-\hbar\omega/kT}. \quad (56)$$

В представлении $\{N\}$ оператор ρ диагонален и n -й элемент его матрицы равен

$$\rho_n \equiv \langle n | \rho | n \rangle = \frac{e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\omega}{kT}}}{Z \left(\frac{1}{kT} \right)} = (1-y) y^n. \quad (57)$$

Из уравнений (53–57) находим

$$\Phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho_n g_n(\xi) = (1-y) e^{-x/2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(n+s)!}{n! (s!)^2} x^s y^n.$$

Эта двойная сумма может быть вычислена точно. Суммирование по n производится с помощью разложения в ряд

$$\frac{1}{(1-y)^{s+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s+n)!}{s! n!} y^n,$$

$$\Phi(\xi) = e^{-x/2} \sum_s \frac{1}{s!} \left(\frac{x}{1-y} \right)^s = \exp \left[x \left(\frac{1}{1-y} - \frac{1}{2} \right) \right].$$

Учитывая определения x и y , это можно записать в виде

$$\varphi(\xi) = e^{-\frac{\sigma}{2} \xi^2}, \quad (58)$$

где

$$\sigma = \gamma \gamma^* \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2kT} \right). \quad (59)$$

Поскольку характеристическая функция распределения является гауссовой, само распределение также выражается законом Гаусса: это распределение со средним квадратичным отклонением σ , что и требовалось доказать.

Раздел III. ИЗОТРОПНЫЕ МНОГОМЕРНЫЕ ГАРМОНИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ

§ 13. Общее исследование изотропного осциллятора в p измерениях

Гармонический изотропный осциллятор в p измерениях есть p -мерная система с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^p \mathcal{H}_i, \quad (60)$$

где

$$\mathcal{H}_i = \frac{1}{2m} (p_i^2 + m^2 \omega^2 q_i^2). \quad (61)$$

Пусть $\mathcal{E}_1$ — пространство динамических состояний, относящееся к паре переменных (p_1, q_1) , $\mathcal{E}_2$ — пространство состояний, относящееся к паре (p_2, q_2) и т. д. Пространство $\mathcal{E}$ динамических состояний рассматриваемой системы есть тензорное произведение пространств $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_p$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_p. \quad (62)$$

Обозначим с помощью $|n_i\rangle$ (i фиксировано, $n_i = 0, 1, \dots, \infty$) собственные векторы гамильтониана $\mathcal{H}_i$, рассматриваемого как оператор в пространстве $\mathcal{E}_i$; эти векторы образуют полную ортонормированную систему в $\mathcal{E}_i$. В дальнейшем будем предполагать, что фазы векторов выбраны так, что выполняются соотношения (17—20), где операторы рождения и уничтожения относятся к переменным типа i . Векторы

$$|n_1 n_2 \dots n_p\rangle \equiv |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_p\rangle \quad (63)$$

$$(n_1 = 0, 1, \dots, \infty; \quad n_2 = 0, 1, \dots, \infty; \quad \dots; \quad n_p = 0, 1, \dots, \infty),$$

образованные тензорным умножением векторов, принадлежащих соответственно пространствам $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_p$, образуют

полную ортонормированную систему в $\mathcal{E}^2$). Ясно, что эти векторы являются собственными векторами $\mathcal{H}$. Далее, поскольку

$$\mathcal{H}_1 |n_1\rangle = (n_1 + 1/2) \hbar \omega |n_1\rangle,$$

$$\mathcal{H}_p |n_p\rangle = (n_p + 1/2) \hbar \omega |n_p\rangle,$$

имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{H} |n_1 \dots n_p\rangle &= (\mathcal{H}_1 + \dots + \mathcal{H}_p) |n_1 \dots n_p\rangle = \\ &= (n_1 + \dots + n_p + p/2) \hbar \omega |n_1 \dots n_p\rangle. \end{aligned}$$

Векторы базисной системы $\mathcal{H}$, которые мы построили, нумеруются p квантовыми числами $n_1, n_2, \dots, n_p$, которые могут принимать все целые значения от 0 до $+\infty$. Однако соответствующее собственное значение энергии

$$(n_1 + \dots + n_p + p/2) \hbar \omega$$

зависит только от суммы

$$n = n_1 + n_2 + \dots + n_p$$

этих p чисел. При заданном значении n (≥ 0) существует

$$C_{n+p-1}^n \equiv \frac{(n+p-1)!}{n! (p-1)!} \quad (64)$$

различных наборов чисел $n_1, n_2, \dots, n_p$. Собственное значение $(n + p/2) \hbar \omega$, таким образом, C_{n+p-1}^n -кратно вырождено.

Введем операторы поглощения и рождения квантов типа i :

$$\begin{aligned} a_i &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q_i + i (2m\hbar\omega)^{-1/2} p_i, \\ a_i^+ &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q_i - i (2m\hbar\omega)^{-1/2} p_i. \end{aligned} \quad (65)$$

Они удовлетворяют коммутационным соотношениям (см. (10))

$$\begin{aligned} [a_i, a_j] &= [a_i^+, a_j^+] = 0, \\ [a_i, a_j^+] &= \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, p). \end{aligned} \quad (66)$$

Согласно определению векторов $|n_i\rangle$, данному выше, векторы $|n_1 \dots n_p\rangle$ удовлетворяют соотношениям, обобщающим (17—20). В частности, если обозначить символом $|0\rangle$ собственный вектор основного состояния

$$|0\rangle = \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{p \text{ раз}},$$

²⁾ В представлении $\{q\} \equiv \{q_1 q_2 \dots q_p\}$ вектор $|n_1 n_2 \dots n_p\rangle$ выражается произведением

$$\langle q_1 | n_1 \rangle \langle q_2 | n_2 \rangle \dots \langle q_p | n_p \rangle \equiv \psi_{n_1}(q_1) \psi_{n_2}(q_2) \dots \psi_{n_p}(q_p).$$

то можно написать

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \dots = a_p|0\rangle = 0, \quad (67)$$

$$|n_1 \dots n_p\rangle = (n_1! \dots n_p!)^{-1/2} a_1^{+n_1} \dots a_p^{+n_p} |0\rangle. \quad (68)$$

Спектр наблюдаемых

$$N_i \equiv a_i^+ a_i \quad (i = 1, 2, \dots, p) \quad (69)$$

состоит из целых неотрицательных чисел; эти наблюдаемые интерпретируются как число квантов типа 1, 2, ..., p соответственно. Сумма

$$N = \sum_{i=1}^p N_i$$

есть полное число квантов. Имеем

$$\mathcal{H} = (N + p/2) \hbar \omega.$$

Ясно, что $N_1, N_2, \dots, N_p$ образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, причем их базисная система совпадает с базисной системой $\mathcal{H}$, которую мы построили.

Операторы N_i , очевидно, не являются единственными постоянными движения, образующими полный набор. Всякий оператор вида $a_i a_j^+$ коммутирует с $\mathcal{H}$; с помощью линейных комбинаций операторов этого типа и им сопряженных можно построить p^2 независимых эрмитовых операторов. Среди функций от этих p^2 постоянных движения существует несколько полных наборов коммутирующих наблюдаемых. Проиллюстрируем это обстоятельство на примере двух частных случаев $p = 2$ и $p = 3$.

§ 14. Изотропный осциллятор в двух измерениях

Рассмотрим систему в двух измерениях с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_1^2 + m^2 \omega^2 q_1^2) + \frac{1}{2m} (p_2^2 + m^2 \omega^2 q_2^2).$$

Исследование предшествующего параграфа полностью применимо к этому частному случаю. Следующая таблица дает собственные значения $\mathcal{H}$ (первый столбец), кратность вырождения (второй столбец) и последовательность общих собственных векторов N_1 и N_2 , растягивающих соответствующие подпространства

(третий столбец):

$$\begin{array}{lll}
 \hbar\omega & 1 & |00\rangle \\
 2\hbar\omega & 2 & |10\rangle, |01\rangle \\
 3\hbar\omega & 3 & |20\rangle, |11\rangle, |02\rangle \\
 \vdots & \vdots & \vdots \\
 (n+1)\hbar\omega & (n+1) & |n0\rangle, |(n-1)1\rangle, \dots, |(n-s)s\rangle, \dots, |0n\rangle \\
 \vdots & \vdots & \vdots
 \end{array} \quad (70)$$

Оператор «момента импульса» L , определенный формулой

$$L = \frac{1}{\hbar} (q_1 p_2 - q_2 p_1) = i(a_1 a_2^\dagger - a_1^\dagger a_2), \quad (71)$$

является постоянной движения. Покажем, что N и L образуют другой полный набор коммутирующих наблюдаемых. С этой целью введем операторы

$$\begin{aligned}
 A_\pm &= \frac{\sqrt{2}}{2} (a_1 \mp i a_2), \\
 A_\pm^\dagger &= \frac{\sqrt{2}}{2} (a_1^\dagger \pm i a_2^\dagger).
 \end{aligned} \quad (72)$$

Эти операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям, тождественным (66):

$$\begin{aligned}
 [A_r, A_s] &= [A_r^\dagger, A_s^\dagger] = 0, \\
 [A_r, A_s^\dagger] &= \delta_{rs} \quad (r = + \text{ или } -, s = + \text{ или } -).
 \end{aligned} \quad (73)$$

Операторы A_+ и $A_+^\dagger$ можно считать операторами уничтожения и рождения квантов типа $(+)$, операторы A_- и $A_-^\dagger$ — операторами уничтожения и рождения квантов типа $(-)$; согласно этой интерпретации операторы

$$N_+ = A_+^\dagger A_+ \quad \text{и} \quad N_- = A_-^\dagger A_- \quad (74)$$

представляют число квантов $(+)$ и число квантов $(-)$ соответственно. Поскольку соотношения коммутации (73) идентичны соотношениям (66) задача построения общих собственных векторов N_+ и N_- математически идентична задаче построения общих собственных векторов N_1 и N_2 . Следовательно, наблюдаемые N_+ и N_- каждая имеют спектр собственных значений из целых неотрицательных чисел

$$n_+ = 0, 1, 2, \dots, \quad n_- = 0, 1, 2, \dots,$$

и эти две наблюдаемые образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых: каждой паре квантовых чисел (n_+, n_-) соответствует единственный общий собственный вектор (с точностью до постоянного множителя),

Из соотношений (67) следует

$$A_+ |00\rangle = A_- |00\rangle = 0. \quad (75)$$

Следовательно, вектор $|00\rangle$ из таблицы (70) есть собственный вектор основного состояния ($n_+ = n_- = 0$). Векторы

$$|n_+ n_-\rangle = (n_+! n_-!)^{-1/2} A_+^{n_+} A_-^{n_-} |00\rangle \quad (76)$$

образуют полную ортонормированную последовательность общих собственных векторов N_+ и N_- :

$$N_+ |n_+ n_-\rangle = n_+ |n_+ n_-\rangle,$$

$$N_- |n_+ n_-\rangle = n_- |n_+ n_-\rangle.$$

Однако если выразить N и L через A и $A^\dagger$, то можно показать, что

$$N = N_+ + N_-,$$

$$L = N_+ - N_-.$$

Ввиду того что наблюдаемые N_+ и N_- образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых, их сумма N и их разность L также обладают этим свойством. Именно это мы и хотели показать.

Мы приходим к выводу, что обладаем другой полной ортонормированной последовательностью собственных векторов $\mathcal{H}$, а именно $|n_+ n_-\rangle$. Они удовлетворяют уравнениям на собственные значения:

$$\mathcal{H} |n_+ n_-\rangle = (n_+ + n_- + 1) \hbar \omega |n_+ n_-\rangle, \quad (77)$$

$$L |n_+ n_-\rangle = (n_+ - n_-) |n_+ n_-\rangle. \quad (78)$$

Определим соотношения коммутации L с A и $A^\dagger$. Простое вычисление дает:

$$[L, A_\pm^\dagger] = \pm A_\pm^\dagger, \quad (79)$$

$$[L, A_\pm] = \mp A_\pm. \quad (80)$$

Отсюда следует, что при действии на собственный вектор оператора L операторы $A_+^\dagger$ и A_- увеличивают собственное значение L на единицу, а $A_+^\dagger$ и A_+ уменьшают L на единицу. Это можно истолковать разными способами. В квантовой теории заряженных полей, где поле представляется как последовательность изотропных осцилляторов в двух измерениях, N_+ выражает число положительных частиц, N_- — число отрицательных частиц, L — полный заряд (с точностью до постоянного множителя). Согласно этой интерпретации $A_+^\dagger$ порождает положительный заряд, A_- уничтожает отрицательный заряд, поэтому и тот и другой опе-

раторы изменяют заряд на плюс единицу; $A_-^\dagger$ и A_+ изменяют заряд на минус единицу.

В теории колебаний кристаллов движения решетки также представляются набором изотропных двумерных осцилляторов; кванты колебаний решетки называются фононами. Представление с фононами типа 1' и 2 дает классификацию по стационарным волнам; представление с фононами типа (+) и (—) соответствует бегущим волнам, «распространяющимся» в том или ином направлении. В задачах о рассеянии (нейтронов, рентгеновских лучей и т. д.) на кристаллической решетке представление с бегущими волнами приводит к более простым вычислениям.

§ 15. Изотропный осциллятор в трех измерениях

Изотропный гармонический осциллятор в трех измерениях есть частица в поле центрально-симметричного потенциала, пропорционального квадрату расстояния от центра. Гамильтониан выражается формулой

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \quad (81)$$

он является суммой трех членов

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_z,$$

где

$$\mathcal{H}_i = \frac{1}{2m} (p_i^2 + m^2\omega^2 r_i^2) \quad (i = x, y, z). \quad (82)$$

Согласно результатам § 13 собственные значения оператора $\mathcal{H}$ выражаются формулой

$$(n + 3/2) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots, \infty); \quad (83)$$

порядок вырождения собственных значений равен $(n+1) \times \times (n+2)/2$. Наблюдаемые N_x, N_y, N_z образуют полный набор постоянных движения, и собственные векторы $|n_x n_y n_z\rangle$ их базисной системы нумеруются тремя собственными значениями n_x, n_y и n_z . Все эти векторы получаются по формуле

$$|n_x n_y n_z\rangle = (n_x! n_y! n_z!)^{-1/2} a_x^{\dagger n_x} a_y^{\dagger n_y} a_z^{\dagger n_z} |000\rangle \quad (84)$$

из вектора основного состояния $|000\rangle$, который с точностью до постоянного множителя определяется тремя уравнениями

$$a_x |000\rangle = a_y |000\rangle = a_z |000\rangle = 0. \quad (85)$$

Введем момент импульса

$$l \equiv [rp].$$

По хорошо известным свойствам (гл. IX) гамильтониана с центрально-симметричным потенциалом операторы $\mathcal{H}$, l^2 и l_z также образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых: общие этим трем наблюдаемым собственные векторы $|nlm\rangle$ отмечаются тремя квантовыми числами n, l, m , причем собственные значения $\mathcal{H}$, l^2 , l_z соответственно равны: $(n + 3/2)\hbar\omega$, $l(l+1)\hbar^2$ и $m\hbar$. Векторы $|nlm\rangle$ составляют полную ортонормированную систему собственных векторов $\mathcal{H}$; они получаются из векторов $|n_x n_y n_z\rangle$ с помощью унитарного преобразования. Мы не будем проводить здесь явного вычисления этих векторов³⁾. Ограничимся тем, что найдем значения, которые могут принимать квантовые числа l и m при заданном n , иначе говоря, найдем различные возможные состояния момента импульса для каждого уровня энергии.

Большое сходство между оператором l_z и оператором L , введенным в предыдущем параграфе, наводит на мысль об аналогичной замене переменных. Вводим операторы A_m ($m = 1, 0, -1$) по формулам

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\sqrt{2}}{2} [a_x - ia_y], \\ A_0 &= a_z, \\ A_{-1} &= \frac{\sqrt{2}}{2} [a_x + ia_y] \end{aligned} \quad (86)$$

и соответствующие эрмитово сопряженные операторы $A_m^\dagger$. Операторы A_m и $A_m^\dagger$ удовлетворяют коммутационным соотношениям, аналогичным (73), и могут быть истолкованы как операторы уничтожения и рождения квантов типа m . Число квантов типа m представляется оператором $N_m = A_m^\dagger A_m$. Очевидно, что N_1, N_0 и N_{-1} составляют полный набор коммутирующих наблюдаемых и что

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= (N_1 + N_0 + N_{-1} + 3/2)\hbar\omega, \\ N &= N_1 + N_0 + N_{-1}. \end{aligned}$$

³⁾ В представлении $\{r\}$ состоянию $|n_x n_y n_z\rangle$ соответствует волновая функция $\psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z)$, состояние же $|nlm\rangle$ представляется функцией

$$\psi_{nlm}(r) \equiv \frac{y_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi),$$

где y_{nl} есть решение, обращающееся в нуль в начале координат и регулярное на бесконечности следующего дифференциального уравнения:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] y_{nl} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega y_{nl}.$$

Каждой тройке собственных значений (n_1, n_0, n_{-1}) соответствует общий собственный вектор трех наблюдаемых, а именно, вектор

$$|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n_1! n_0! n_{-1}!)^{-1/2} A_1^{+n_1} A_0^{+n_0} A_{-1}^{+n_{-1}} |000\rangle.$$

Множество всех этих векторов образует полную систему собственных векторов $\mathcal{H}$. Находим

$$\mathcal{H} |n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n + 3/2) \hbar \omega |n_1 n_0 n_{-1}\rangle, \quad n = n_1 + n_0 + n_{-1}.$$

Построенные нами векторы в общем случае не являются собственными векторами l^2 , но это собственные векторы l_z , так как

$$l_z = (N_1 - N_{-1}) \hbar \quad (87)$$

и, следовательно,

$$m = n_1 - n_{-1}. \quad (88)$$

Рассмотрим подпространство собственных векторов $\mathcal{H}$, принадлежащих собственному значению $(n + 3/2) \hbar \omega$. Оно натянуто на $(n + 1)(n + 2)/2$ векторов $|n_1 n_0 n_{-1}\rangle$ (при этом $n_1 + n_0 + n_{-1} = n$), которые образуют полную ортонормированную последовательность собственных векторов l_z . Согласно уравнению

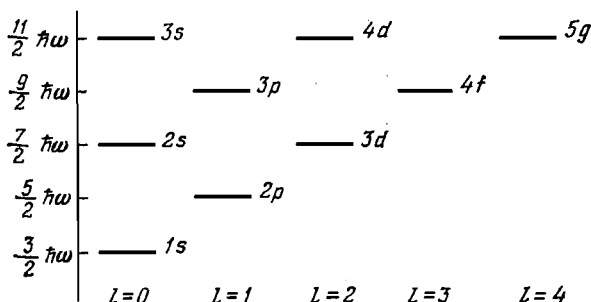


Рис. 37. Спектр трехмерного гармонического осциллятора.

(88), квантовое число m может принимать все целые значения между $-n$ и $+n$. Нетрудно найти число c_m линейно независимых векторов, принадлежащих каждому значению m ; результат приведен в следующей таблице:

$$\begin{array}{cccccccc} |m| = n & n-1 & n-2 & \dots & n-2s & n-(2s+1) & n-(2s+2) & \dots \\ c_m = 1 & 1 & 2 & \dots & s+1 & s+1 & s+2 & \dots \end{array} \quad (89)$$

Однако по свойствам момента импульса каждому собственному значению l^2 , т. е. каждому значению l , соответствует некоторое число серий из $2l + 1$ векторов с заданными (lm) , при этом в

каждой серии число m принимает $2l + 1$ целых значений от $-l$ до $+l$. Пусть d_l это число серий. Очевидно, что

$$c_m = \sum_{l \geq m} d_l$$

и поэтому

$$d_l = c_l - c_{l+1}.$$

Обращаясь к таблице (89), мы видим, что $d_l = 1$ для $l = n, n-2, \dots, n-2s, \dots$, т. е. для всех целых значений l четности $(-1)^n$, заключенных между 0 и n (включая крайние значения) и что $d_l = 0$ для всех остальных значений l .

В заключение отметим, что каждому собственному значению $(n + 3/2)\hbar\omega$ энергии соответствует $(n + 1)(n + 2)/2$ состояний момента импульса (lm). Для каждого возможного значения l существует $2l + 1$ собственных состояний, соответствующих $2l + 1$ значениям m от $-l$ до $+l$. Значения, которые может принимать квантовое число l , таковы:

$n, n-2, \dots, 0$, если $(-1)^n = 1$ ($\frac{n+2}{2}$ различных значений),

$n, n-2, \dots, 1$, если $(-1)^n = -1$ ($\frac{n+1}{2}$ различных значений).

Спектроскопическая диаграмма на рис. 37 представляет основное и первые возбужденные состояния трехмерного изотропного гармонического осциллятора. Полезно сравнить эту диаграмму с соответствующей диаграммой для атома водорода (рис. 36).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть a и a^+ — два эрмитово сопряженных оператора, причем $[a, a^+] = 1$. Полагаем $N = a^+a$. Показать, что:

$$a) [N, a^p] = -pa^p; \quad [N, a^{+p}] = +pa^{+p} \quad (p \text{ целое } > 0);$$

б) единственными алгебраическими функциями от a и a^+ , коммутирующими с N , являются функции от N .

2. Показать, что операторы a и a^+ задачи 1 не имеют обратных.

3. Построить матрицы, представляющие операторы q и p в представлении $\{N\}$ (обозначения § 5). Проверить, что они являются эрмитовыми и удовлетворяют условиям коммутации (2). Рассмотреть проблему собственных значений q в этом представлении, проверить, что спектр q является простым, непрерывным и распространяется от $-\infty$ до $+\infty$, выписать в явном виде собственный вектор, принадлежащий собственному значению 0.

4. Сравниваются свойства квантового осциллятора в состоянии $|n\rangle$ и микроканонического ансамбля классических осцилляторов при той же энергии (§ 10). Показать, что статистическое распределение переменной q в этом

квантовом состоянии обнаруживает осцилляции, тем более частые, чем больше квантовое число n , и в пределе $n \rightarrow \infty$ его среднее значение на нескольких периодах стремится к соответствующему распределению для ансамбля классических осцилляторов (использовать метод ВКБ).

5. Пусть χ_0 , ω_0 , η_0 — начальные значения следующих средних величин:

$$\begin{aligned}\chi &= \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2, \\ \omega &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2, \\ \eta &= \langle pq + qp \rangle - 2 \langle p \rangle \langle q \rangle,\end{aligned}$$

относящихся к волновому пакету гармонического осциллятора. Установить закон эволюции во времени этих средних величин. Показать, что он выражается функциями вида $A + B \cos 2\omega t + C \sin 2\omega t$ и что χ и ω остаются постоянными во времени в том и только в том случае, если

$$\eta_0 = 0, \quad \omega_0 = m^2 \omega^2 \chi_0.$$

6. Состояние гармонического осциллятора в начальный момент времени 0 представляется минимизирующим волновым пакетом

$$f(q) = (2\pi\sigma)^{-1/4} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle q - \frac{(q - \langle q \rangle)^2}{4\sigma} \right].$$

Показать, что этот пакет остается минимизирующим в том и только в том случае, если $\sigma = \hbar/2m\omega$ (см. задачу 5).

Пусть это условие выполнено. Показать, что в этом случае $f(q)$ есть волновая функция, представляющая состояние

$$|f\rangle = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle q \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \langle q \rangle p \right) |0\rangle.$$

Вывести отсюда (пользуясь тождеством (29)), что функция $f(q, t)$ получается с точностью до фазового множителя, если подставить в $f(q)$, вместо значений $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$ в момент времени 0, их значения в момент времени t . Определить коэффициенты c_n разложения $|f\rangle$ в ряд по собственным векторам гамильтониана и показать, что

$$\begin{aligned}|c_n|^2 &= e^{-\alpha} \frac{\alpha^n}{n!}, \\ \alpha &= \frac{E_{\text{кл}}}{\hbar\omega}; \\ E_{\text{кл}} &= \frac{1}{2m} (\langle p \rangle^2 + m^2 \omega^2 \langle q \rangle^2).\end{aligned}$$

7. Проверить, что теорема Блоха (§ 12) применима также и к классическому гармоническому осциллятору и что статистическое распределение величины $\alpha q + \beta p$ для квантового гармонического осциллятора в термодинамическом равновесии стремится к классическому распределению при достаточно больших температурах $kT \gg \hbar\omega$.

8. Показать, что гамильтониан частицы с массой m и зарядом e в постоянном магнитном поле $\mathcal{H}$, направленном по оси Oz , имеет вид

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + H_\rho,$$

где

$$H_\rho = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) - \frac{e}{2mc} \mathcal{H} l_z + \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{H}^2 (x^2 + y^2).$$

Показать, что операторы p_z , l_z , H_ρ образуют полный набор коммутирующих постоянных движения и что их общие собственные функции в цилиндрических координатах (z, ρ, θ) могут быть представлены в виде $\exp(ikz) \times \exp(i\lambda\theta) \cdot v_{\lambda n}(\rho)$. Здесь k — некоторое вещественное число; $\lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm\infty$; $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$. Соответствующими собственными значениями являются

$$\hbar k, \quad \hbar \lambda, \quad (2n+1) \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H}.$$

Сравнить эти результаты с выводами задачи II. 4.

ДОПОЛНЕНИЕ А

ОБОБЩЕННЫЕ ФУНКЦИИ, «ФУНКЦИЯ» δ

И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Раздел I. КРАТКИЙ ОБЗОР ТЕОРИИ ОБОБЩЕННЫХ ФУНКЦИЙ¹⁾

§ 1. Понятие функционала и строгий подход к проблеме непрерывного спектра

«Функция» δ Дирака, применение которой позволяет трактовать непрерывный спектр в полной аналогии с дискретным спектром, по существу не является строго определенным математическим объектом. Корректное теоретическое исследование наблюдаемых, обладающих непрерывным спектром, требует иной постановки проблемы собственных значений.

Собственные функции наблюдаемых в волновой механике встречаются только в форме скалярных произведений с волновыми функциями, т. е. в форме скалярных произведений с функциями, квадрат модуля которых интегрируем. Пусть F — одна из собственных функций, а ψ — произвольно выбранная волновая функция, тогда скалярное произведение $\langle \psi, F \rangle$ (обозначения гл. V) можно рассматривать как антилинейный функционал ψ^* . Обозначим последний символом $\hat{F}$, тогда по определению

$$\hat{F}[\psi] = \langle \psi^*, F \rangle.$$

Следовательно, теория оперирует не с собственными функциями как таковыми, а с некоторыми функционалами, сопоставленными каждой собственной функции.

Функционалы волновой механики принадлежат некоторому классу функционалов, называемых обобщенными функциями, относительно которых можно с некоторыми ограничениями определить те же операции алгебры и анализа, что и относительно обыкновенных функций. Поэтому можно строго формулировать волновую механику, рассматривая операторы теории как операторы, действующие на обобщенные функции; при этом собственные решения эрмитового оператора суть обобщенные функции частного вида; это линейные и непрерывные функционалы от ограниченных квадратично интегрируемых функций, которые удовлетворяют уравнению на собственные значения этого оператора.

Пусть X и Ξ — две наблюдаемые, спектр которых ради простоты будем предполагать всюду непрерывным и невырожденным, и пусть $\langle \xi | x \rangle$ есть матрица унитарного преобразования, связывающего представление $\{X\}$ и представление $\{\Xi\}$. В строгой формулировке квантовой теории $\langle \xi | x \rangle$ представляет одновременно:

¹⁾ См. *L. Schwartz*, *Théorie des distributions*, Hermann (Paris, 1950—1951); см. также того же автора, *Les Méthodes Mathématiques de Physique*, Cours de Sorbonne (Paris, 1955); см. также *В. С. Владимиров*, *Обобщенные функции в математической физике*, «Наука», 1976; *В. С. Владимиров*, *Уравнения математической физики*, «Наука», 1971.

а) множество собственных решений X в представлении $\{\Xi\}$, т. е. некоторую последовательность функционалов от функций переменной ξ , отмечаемую непрерывным индексом x ;

б) множество собственных решений Ξ в представлении $\{X\}$, т. е. некоторую последовательность функционалов от функций переменной x , отмечаемую непрерывным индексом ξ .

В этом разделе мы дадим точное определение обобщенных функций и укажем без доказательства их основные свойства.

§ 2. Определение обобщенных функций

Обозначим с помощью $\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n)$, или просто $\varphi(x)$, некоторую функцию n непрерывных переменных $x_1, \dots, x_n$, отличные от нуля значения которой принадлежат ограниченной области изменения этих переменных и которая дифференцируема по этим переменным сколько угодно раз (бесконечно дифференцируемая функция с ограниченным носителем).

По определению *обобщенная функция* $T[\varphi]$ есть *линейный и непрерывный функционал функций* φ .

Линейность означает, что для всех линейных комбинаций $\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2$ имеем

$$T[\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2] = \lambda_1 T[\varphi_1] + \lambda_2 T[\varphi_2].$$

Непрерывность же означает, что для всякой последовательности $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_j, \dots$ функций φ , такой что $\lim_{j \rightarrow \infty} \varphi_j = \varphi$, имеем

$$\lim_{j \rightarrow \infty} T[\varphi_j] = T[\varphi].$$

Всякой *локально интегрируемой функции* f (т. е. функции, интеграл от которой ²⁾ по конечному интервалу существует) соответствует обобщенная функция $\hat{f}$, определяемая скалярным произведением

$$\hat{f}[\varphi] = \int f(x) \varphi(x) dx = \langle \varphi^*, f \rangle. \quad (1)$$

Две локально интегрируемые функции определяют одну обобщенную функцию, если они равны почти всюду (т. е. всюду, кроме множества точек меры нуль). В частности, волновые функции волновой механики (квадратично интегрируемые функции) определяют обобщенные функции.

Функция $1/x$ не может соответствовать никакой обобщенной функции, так как эта функция не интегрируема в точке $x = 0$. Но можно определить обобщенную функцию

$$P \frac{1}{x} [\varphi] \equiv \text{v. p.} \int \frac{\varphi(x)}{x} dx, \quad (2)$$

где символ *v. p.* обозначает главное значение интеграла в смысле Коши:

$$\text{v. p.} \int_{-\infty}^{+\infty} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{+\infty} \right\}.$$

²⁾ Интегралы, о которых идет речь, суть интегралы в смысле Лебега. Интеграл Лебега сводится к интегралу в обычном смысле, т. е. к интегралу Римана, каждый раз, когда последний имеет смысл, однако, интеграл Лебега может существовать и тогда, когда интеграл Римана не определен.

«Функция» Дирака δ определяет обобщенную функцию согласно равенству

$$\delta[\varphi] = \varphi(0). \quad (2)$$

Аналогичным образом «функция» $\delta(x - x_0)$ определяет обобщенную функцию

$$\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0). \quad (4)$$

З а м е ч а н и е. Обобщенная функция может быть, вообще говоря, определена на более широком функциональном пространстве, чем пространство функций φ . Действительно, если $U[\varphi]$ является линейным и непрерывным функционалом функций φ из функционального пространства, более широкого, чем пространство функций φ , то функционал $U[\varphi]$ вполне определен, линеен и непрерывен в пространстве функций φ : следовательно, U есть обобщенная функция.

Примеры: δ_{x_0} определена на пространстве функций $\alpha(x)$, непрерывных в точке $x = x_0$:

$$\delta_{x_0}[\alpha] = \alpha(x_0).$$

Обобщенная функция $\hat{\Psi}$, соответствующая квадратично интегрируемой функции, определена на пространстве квадратично интегрируемых функций:

$$\hat{\Psi}[\psi] = \int \Psi \psi dx = (\psi^*, \Psi).$$

Линейные и непрерывные функционалы волновых функций волновой механики являются обобщенными функциями частного вида.

§ 3. Линейная комбинация обобщенных функций

$T = \lambda_1 T_1 + \lambda_2 T_2$ является обобщенной функцией, определяемой равенством

$$T[\varphi] = \lambda_1 T_1[\varphi] + \lambda_2 T_2[\varphi]$$

(λ_1, λ_2 — заданные комплексные постоянные).

§ 4. Произведение двух обобщенных функций

Если f есть обобщенная функция, соответствующая локально интегрируемой функции f , а T — некоторая обобщенная функция, то обобщенная функция

$$P = fT$$

определена, если T есть линейный непрерывный функционал функций $f\varphi$ и по определению

$$P[\varphi] = T[f\varphi]. \quad (5)$$

Произведение двух обобщенных функций *существует не всегда*. Если f бесконечно дифференцируема, то fT существует при любых T . Если f непрерывна в точке x_0 , то

$$(f\delta_{x_0})[\varphi] = f(x_0)\varphi(x_0). \quad (6)$$

Если f и g обе являются квадратично интегрируемыми функциями, то произведение fg определено. Напротив, $[\delta(x)]^2$ не имеет смысла, $(1/\sqrt{|x|})^2$ — также.

В качестве частного случая уравнения (6) имеем соотношение

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

Обратно, если $xT = 0$, то T пропорционально δ : $T = c\delta$ (c — постоянная).

Вследствие этого, если $f(x)$ и $g(x)$ связаны соотношением

$$xf(x) = g(x),$$

то необходимо имеем

$$f(x) = P \frac{g(x)}{x} + c\delta(x), \quad (8)$$

где c — произвольная постоянная.

§ 5. Ряды и интегралы обобщенных функций

Если последовательность обобщенных функций $T_1, T_2, \dots, T_j, \dots$ такова, что при $j \rightarrow \infty$ при любой φ $T_j[\varphi]$ имеет предел, то этот предел является обобщенной функцией (т. е. линейным и непрерывным функционалом от φ):

$$T = \lim_{j \rightarrow \infty} T_j.$$

Эквивалентное утверждение: если бесконечный ряд $\sum_i T_i[\varphi]$ сходится при любой φ , то сумма ряда определяет обобщенную функцию; говорят, что ряд обобщенных функций $\sum_i T_i$ сходится.

Если $T(\lambda)$ — обобщенная функция, зависящая от параметра λ , изменяющегося непрерывно в некоторой области Λ , и если интеграл

$$I[\varphi] = \int_{\Lambda} T(\lambda)[\varphi] d\lambda$$

сходится при любой функции φ , то интеграл определяет обобщенную функцию

$$I = \int_{\Lambda} T(\lambda) d\lambda.$$

Аналогичное определение имеет место для многократных интегралов.

В частности, если $f(x, \lambda)$ интегрируема по x (локально) и по λ , то обобщенная функция $f(\lambda)$ интегрируема по λ и ее интеграл есть обобщенная функция g , соответствующая функции

$$g(x) = \int f(x, \lambda) d\lambda.$$

Если функция $a(k)$ при $|k| \rightarrow \infty$ мажорируется некоторой положительной степенью $|k|$: $|a(k)| \leq A|k|^\alpha$ (A и α — положительные постоянные), то

интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} a(k) dk$ является обобщенной функцией.

В частности,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi\delta.$$

§ 6. Дифференцирование обобщенных функций

По определению производная $\partial T/\partial x_i$ обобщенной функции есть

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} [\varphi] = -T \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right]. \quad (9)$$

В частности, если локально интегрируемая функция дифференцируема, то производная соответствующей обобщенной функции есть обобщенная функция, соответствующая ее производной. Действительно, интегрируя по частям, имеем

$$\dot{f}' [\varphi] = \int f'(x) \varphi(x) dx = - \int f(x) \varphi'(x) dx = - \dot{f} [\varphi'].$$

Все свойства производных обычных функций переносятся на производные обобщенных функций. Например, производная произведения $P = \dot{f}T$ есть

$$P' = \dot{f}'T + \dot{f}T'. \quad (10)$$

Но, кроме того, некоторые результаты, относящиеся к более или менее ограниченным классам функций, справедливы по отношению ко всем обобщенным функциям без ограничений. Именно:

1°. *Обобщенные функции бесконечно дифференцируемы.*

В частности, локально интегрируемые функции $\lg |x|$, $\frac{1}{r}$ ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$) дифференцируемы как обобщенные функции произвольное число раз:

$$\frac{d}{dx} \lg |x| = P \frac{1}{x}, \quad (11)$$

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta \quad (\delta \equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z)). \quad (12)$$

2°. *Дифференцирование является линейной непрерывной операцией в пространстве обобщенных функций:*

$$\text{если } \lim_{j \rightarrow \infty} T_j = T, \quad \text{то } \lim_{j \rightarrow \infty} T_j' = T'.$$

Следовательно, если ряд сходится, то он дифференцируем почленно под знаком суммы. Аналогично, если $T(\lambda)$ интегрируема по параметру λ :

$$I = \int_{\Lambda} T(\lambda) d\lambda,$$

то $\partial T(\lambda)/\partial x_i$ обязательно интегрируема в той же области λ и ее интеграл равен $\partial I/\partial x_i$.

Раздел II. СВОЙСТВА «ФУНКЦИЙ» δ

§ 7. Определение $\delta(x)$

В физике принято использовать обозначение $\delta(x - x_0)$ вместо более корректного обозначения $\delta_{x_0}[\varphi]$. При этом не упоминают понятия обобщенной функции, а, соблюдая некоторые предосторожности, манипулируют с символом $\delta(x - x_0)$ как с обычной функцией. Это значительно упрощает все формулы.

По определению, если $f(x)$ определена в точке $x = x_0$, то

$$\int f(x) \delta(x - x_0) dx = \delta_{x_0} [f(x)] = f(x_0). \quad (13)$$

Таким образом, формально

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & \text{если } x \neq x_0, \\ +\infty & \text{если } x = x_0 \end{cases} \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) dx = 1. \quad (14)$$

Символ $\delta(x - x_0)$ является обобщением символа Кронекера

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{если } m \neq n, \\ 1, & \text{если } m = n. \end{cases}$$

§ 8. Представление в виде предела ядра интегрального оператора

$\delta(x - x_0)$ можно рассматривать как предельную форму функции, принимающей отличные от нуля значения только в некоторой малой области около точки x_0 , где она обнаруживает резкий положительный максимум, причем интеграл от функции по всему пространству остается все время равным 1. Например:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin L(x - x_0)}{x - x_0} = \quad (15a)$$

$$= \frac{1}{\pi} \lim_{\kappa \rightarrow \infty} \frac{1 - \cos \kappa(x - x_0)}{\kappa(x - x_0)^2} = \quad (15б)$$

$$= \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{\varepsilon}{(x - x_0)^2 + \varepsilon^2} = \quad (15в)$$

$$= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{E(x - x_0 + \eta) - E(x - x_0)}{\eta}. \quad (15г)$$

В последнем выражении $E(x)$ есть функция Хевисайда:

$$E(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x > 0, \\ 0, & \text{если } x < 0 \end{cases}.$$

(обобщенная функция δ есть производная обобщенной функции Хевисайда).
Отметим еще важное предельное свойство (формула Сохоцкого)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{x - x_0 \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{x - x_0} \mp i\pi \delta(x - x_0). \quad (15д)$$

§ 9. Основные свойства

Основные свойства «функции» δ таковы:

$$\delta(x) = \delta(-x), \quad (16)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (a \neq 0), \quad (17)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{\delta(x - x_n)}{|g'(x_n)|} \quad (g(x_n) = 0, g'(x_n) \neq 0), \quad (18)$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (19)$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \quad (20)$$

$$\int \delta(x-y)\delta(y-a)dy = \delta(x-a), \quad (21)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \quad (22)$$

Смысл этих равенств состоит в том, что один из членов равенства может быть заменен другим, когда они фигурируют в качестве множителей в подынтегральном выражении некоторого интеграла по x . Все равенства могут быть строго доказаны в теории обобщенных функций (см. раздел 1). Формальное (но не строгое) доказательство состоит в умножении обеих частей равенств на достаточно регулярную функцию $f(x)$ и интегрирование по x , тогда результаты должны быть одинаковы в левой и правой частях. Так, соотношения (16), (17) и (18) доказываются путем замены переменной в интеграле. В равенстве (18) суммирование идет по всем нулям функции $g(x)$; выражение имеет смысл только, если нули $g(x)$ и $g'(x)$ не совпадают; например, $\delta(x^2)$ смысла не имеет.

§ 10. Производные $\delta(x)$

«Функция» δ имеет производные всех порядков. При этом m -я производная определяется равенством

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(m)}(x) f(x) dx = (-1)^m f^{(m)}(0), \quad (23)$$

справедливым для всякой функции $f(x)$, m раз дифференцируемой в точке $x=0$. «Функция» $\delta^{(m)}(x-x_0)$ может рассматриваться как соответствующий предел m -х производных функций в правых частях уравнений (15а), (15б), (15в). Следующие свойства могут быть строго доказаны методами теории обобщенных функций:

$$\delta^{(m)}(x) = (-1)^m \delta^{(m)}(-x), \quad (24)$$

$$\int \delta^{(m)}(x-y)\delta^{(n)}(y-a)dy = \delta^{(m+n)}(x-a), \quad (25)$$

$$x^{m+1}\delta^{(m)}(x) = 0. \quad (26)$$

Первая производная $\delta'(x)$ обладает свойствами:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) dx = -f'(0), \quad (27)$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x), \quad (28)$$

$$\int \delta'(x-y) \delta(y-a) dy = \delta'(x-a). \quad (29)$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x), \quad (30)$$

$$x^2\delta'(x) = 0, \quad (31)$$

$$\delta'(x) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k e^{ikx} dk. \quad (32)$$

Раздел III. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ³⁾

§ 11. Преобразование Фурье. Определение

Если $f(x)$ есть функция (вещественная или комплексно-значная) переменной x , то ее преобразование Фурье, если оно существует, выражается формулой

$$F(u) = \mathcal{F}[f] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha u x} f(x) dx, \quad (33)$$

где α — некоторая постоянная (в волновой механике выбирают $\alpha = 1/\hbar$). При некоторых условиях сходимости, которые должны быть уточнены, $f(x)$ может быть получена из $F(u)$ в результате обратного преобразования Фурье

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}[F] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha u x} F(u) du. \quad (33')$$

В более общем случае, если $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — функция n переменных $x_1, \dots, x_n$, то ее преобразование Фурье имеет вид

$$\begin{aligned} F(u_1, \dots, u_n) &= \mathcal{F}[f] = \\ &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{n/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha(u_1 x_1 + \dots + u_n x_n)} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n, \end{aligned} \quad (34)$$

а обратное преобразование определяется формулой

$$\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_n) &= \mathcal{F}^{-1}[F] = \\ &= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{n/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha(u_1 x_1 + \dots + u_n x_n)} F(u_1, \dots, u_n) du_1 \dots du_n. \end{aligned} \quad (34')$$

³⁾ См. сноску ¹⁾; см. также *Е. Титчмарш*, Введение в теорию интегралов Фурье, Гостехиздат, 1948 г.

При условии, что преобразование Фурье f существует, имеем

$$\mathcal{F}[f(cx_1, \dots, cx_n)] = \frac{1}{|c|^n} F\left(\frac{u_1}{c}, \dots, \frac{u_n}{c}\right) \quad (35)$$

(c — произвольная постоянная).

При тех же условиях

$$\mathcal{F}^{-1}[F(cu_1, \dots, cu_n)] = \frac{1}{|c|^n} f\left(\frac{x_1}{c}, \dots, \frac{x_n}{c}\right). \quad (35')$$

В дальнейшем мы без доказательства укажем основные свойства преобразований Фурье функций (или обобщенных функций) одной переменной. Все результаты без труда обобщаются на случай любого числа измерений.

§ 12. Абсолютно интегрируемые функции $f(x)$

Всякая абсолютно интегрируемая функция $f(x)$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)| dx < \infty,$$

обладает преобразованием Фурье

$$F(u) = \mathcal{F}[f].$$

Преобразование Фурье $F(u)$:

(а) непрерывно;

(б) ограничено: $|F(u)| \leq \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)| dx$ при любых u ;

(в) обращается в нуль на бесконечности: $F(u) \xrightarrow{|u| \rightarrow \infty} 0$.

Если $f(x)$ m раз непрерывно дифференцируема и ее m производных абсолютно интегрируемы, то

$$\mathcal{F}[f^{(m)}] = (iau)^m F(u). \quad (36)$$

Если $x^m f(x)$ абсолютно интегрируема, то $F(u)$ m раз непрерывно дифференцируема и

$$F^{(m)}(u) = \mathcal{F}[(-iax)^m f(x)]. \quad (37)$$

Свойства обратного преобразования $\mathcal{F}^{-1}$ получаются из предыдущих, если во всех формулах заменить i на $-i$.

§ 13. Функции χ (основные функции)

Символом $\chi(x)$ будем обозначать бесконечно дифференцируемую функцию, асимптотически стремящуюся к нулю вместе со всеми своими производными, быстрее любой степени $|x|$:

$$|x|^l \chi^{(m)}(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0 \text{ какими бы ни были } m \text{ и } l.$$

В общем случае $\chi(x_1, \dots, x_n)$ обозначает функцию n переменных, бесконечно дифференцируемую и такую, что

$$R^l \frac{\partial^m \chi}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_n}} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0 \quad (R = (x_1^2 + \dots + x_n^2)^{1/2})$$

при любых l, m и любом выборе индексов $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ ($\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n = m$).

Функции ϕ из раздела I являются частным случаем функций χ ; напротив, функции χ не являются обязательно функциями ϕ (пример: e^{-R^2}).

Поскольку функции χ являются абсолютно интегрируемыми, то к ним применимы все результаты предшествующего параграфа. Но, кроме того, имеем следующий результат:

Преобразование Фурье $\mathcal{F}\chi$ и обратное преобразование Фурье $\mathcal{F}^{-1}\chi$ функции χ также являются функциями χ (переменных $u_1, u_2, \dots, u_n$). Кроме того, преобразование Фурье обладает свойством взаимности:

$$\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}\chi = \mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}\chi = \chi$$

($\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}\chi$ означает преобразование Фурье от $\mathcal{F}^{-1}\chi$).

§ 14. Преобразование Фурье обобщенных функций. Определение

Если T — обобщенная функция, то преобразование Фурье $\mathcal{F}T$ есть функционал, определяемый формулой

$$\mathcal{F}T[\phi] = T[\mathcal{F}\phi],$$

а обратное преобразование Фурье есть функционал

$$\mathcal{F}^{-1}T[\phi] = T[\mathcal{F}^{-1}\phi].$$

Поскольку $\mathcal{F}\phi$, $\mathcal{F}^{-1}\phi$ не обязательно являются функциями типа ϕ , может случиться, что функционалы $T[\mathcal{F}\phi]$, $T[\mathcal{F}^{-1}\phi]$ не существуют; в этом случае T не обладает преобразованием Фурье или обратным преобразованием Фурье.

Если f — обобщенная функция, соответствующая функции $f(x)$, и если $F(u)$, в предположении, что оно существует, есть преобразование Фурье функции $f(x)$, то

$$\begin{aligned} \mathcal{F}f[\phi] &= f[\mathcal{F}\phi] = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \left\{ \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iaux} \phi(u) du \right\} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(u) \left\{ \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iaux} f(x) dx \right\} du = \hat{F}[\phi]. \end{aligned}$$

Следовательно, преобразование Фурье обобщенной функции f есть обобщенная функция F , соответствующая преобразованию Фурье функции f .

§ 15. Обобщенные функции медленного роста

Обобщенные функции медленного роста (или умеренные обобщенные функции) по определению являются линейными и непрерывными функционалами от функций χ , т. е. основных функций.

Все свойства обобщенных функций, указанные в разделе I, распространяются на обобщенные функции медленного роста. Достаточно всюду вместо функций ϕ подставить функции χ . В частности, обобщенные функции медленного роста бесконечно дифференцируемы и все их производные являются обобщенными функциями медленного роста.

Квадратично интегрируемые функции, функции, ограниченные во всем пространстве, и вообще все локально интегрируемые *медленно растущие* функции $f(x)$ (для которых можно найти два таких положительных числа A и α , что $|f(x)| \leq A|x|^\alpha$ при $|x| \rightarrow \infty$) определяют обобщенные функции медленного роста; δ, δ_{x_0} и все их производные являются обобщенными функциями медленного роста.

Решения задач волновой механики на собственные значения являются линейными и непрерывными функционалами волновых функций, т. е. квадратично интегрируемых функций $\psi(q_1, \dots, q_R)$. Следовательно, это суть линейные и непрерывные функционалы функций χ , т. е. обобщенные функции медленного роста.

Интерес к обобщенным функциям медленного роста связан с замечательными свойствами их преобразований Фурье.

Если U_x есть обобщенная функция медленного роста (определенная на функциях типа $\chi(x)$), то:

1°. Ее преобразование Фурье V_u и обратное преобразование Фурье V_u^{-1} существуют всегда и являются обобщенными функциями медленного роста (определенными на функциях $\chi(u)$). Они определяются формулами:

$$V_u[\chi] = \mathcal{F}U_x[\chi] = U_x[\mathcal{F}\chi], \quad (38)$$

$$V_u^{-1}[\chi] = \mathcal{F}^{-1}U_x[\chi] = U_x[\mathcal{F}^{-1}\chi]. \quad (38')$$

2°. Преобразования $\mathcal{F}$ и $\mathcal{F}^{-1}$ взаимны:

$$\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}U = \mathcal{F}^{-1}V = U, \quad (39)$$

$$\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}U = \mathcal{F}V^{-1} = U. \quad (40)$$

3°. Производные преобразуются согласно закону:

$$\mathcal{F}(U_x^{(m)}) = (iau)^m V_u, \quad (41)$$

$$\mathcal{F}((-iax)^m U_x) = V_u^{(m)}. \quad (42)$$

§ 16. Квадратично интегрируемые функции

Квадратично интегрируемые функции определяют обобщенные функции медленного роста.

Если условиться не считать различными две функции, равные почти всюду (т. е. всюду, кроме множества точек меры нуль), то свойства преобразования Фурье обобщенных функций медленного роста распространяются на квадратично интегрируемые функции. Но к этим свойствам добавляются еще и свойства, специфические для квадратично интегрируемых функций. Основные теоремы таковы:

Теорема I. Если $f(x)$ — квадратично интегрируемая функция, то интеграл

$$\left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iaux} f(x) dx$$

сходится в смысле среднего квадратичного⁴⁾ к квадратично интегрируемой функции:

$$F(u) \equiv \mathcal{F}f(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \lim_{\xi \rightarrow \infty} \int_{-\xi}^{+\xi} e^{-i\alpha u x} f(x) dx. \quad (43)$$

Теорема II. Соответствие между $f(x)$ и $F(u)$ взаимно в том смысле, что

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1} F(u) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_{-\lambda}^{+\lambda} e^{i\alpha u x} F(u) du. \quad (43')$$

Для всякого значения x , в окрестности которого $f(x)$ имеет ограниченную вариацию,

$$\mathcal{F}^{-1} F(u) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon) + f(x - \varepsilon)}{2}. \quad (44)$$

Теорема III. Пусть квадратично интегрируемые функции $f(x)$ и $F(u)$ являются фурье-преобразованиями друг друга. Если производная $f'(x)$ есть квадратично интегрируемая функция, то ее преобразование Фурье $i\alpha u F(u)$ есть квадратично интегрируемая функция u , наоборот, если $i\alpha u F(u)$ есть квадратично интегрируемая функция, то $f(x)$ дифференцируема и $f'(x)$ есть обратное преобразование Фурье от $i\alpha u F(u)$. Аналогичное соответствие связывает пару $x f(x)$ и $(1/\alpha) F'(u)$.

З а м е ч а н и е. Даже если $f(x)$ как функция не всюду дифференцируема, обобщенная функция (медленного роста) f'_x существует всегда; ее преобразование Фурье есть обобщенная функция (медленного роста) $i\alpha u F(u)$; как функция, эта последняя может не быть квадратично интегрируемой функцией.

Преобразование Фурье сохраняет скалярное произведение квадратично интегрируемых функций (Парсеваль).

Теорема IV. Если $F(u)$ и $G(u)$ являются преобразованиями Фурье квадратично интегрируемых функций $f(x)$ и $g(x)$, то

$$\langle g, f \rangle = \langle G, F \rangle, \quad (45)$$

иначе говоря:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} G^*(u) F(u) du.$$

⁴⁾ Сходимость в смысле среднего квадратичного (менее строгая, чем просто сходимость) функции $\varphi(u, \xi)$ к $\varphi(u)$ при $\xi \rightarrow X$ означает, что

$$\lim_{\xi \rightarrow X} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(u, \xi) - \varphi(u)|^2 du = 0;$$

иначе говоря, $\varphi(u, \xi)$ стремится к $\varphi(u)$ почти всюду. Эту сходимость обычно обозначают символом:

$$\lim_{\xi \rightarrow X} \varphi(u, \xi) = \varphi(u).$$

Таблица преобразований Фурье

$f(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha u x} F(u) du$	$F(u) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha u x} f(x) dx$
$f\left(\frac{x}{c}\right)$ $f(-x)$ $f^*(x)$ $F(x)$	$ c F(cu)$ $F(-u)$ $F^*(-u)$ $f(-u)$
$xf(x)$ $f'(x)$	$\frac{i}{\alpha} F'(u)$ $i\alpha u F(u)$
$f(x-x_0)$ $e^{i\alpha u x_0} f(x)$	$e^{-i\alpha u x_0} F(u)$ $F(u-u_0)$
$\delta(x)$ $\delta(x-x_0)$ $E(x) = \begin{cases} 1 & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x < 0 \end{cases}$	$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}$ $\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-i\alpha u x_0}$ $\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left[\pi \delta(u) - iP \frac{1}{u} \right]$
$\left(\frac{\kappa}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\kappa^2 x^2}$ $\frac{E(x+a) - E(x-a)}{\sqrt{2a}} =$ $= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a}}, & x < a; \\ 0, & x > a \end{cases}$ $\sqrt{\gamma} e^{-\gamma x }$ $i\sqrt{2\gamma} e^{-\gamma x} E(x) =$ $= \begin{cases} i\sqrt{2\gamma} e^{-\gamma x}, & x > 0; \\ 0, & x < 0 \end{cases}$	$\left(\frac{\alpha}{\kappa\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{\alpha^2 u^2}{2\kappa^2}} \quad (\operatorname{Re} \kappa > 0, \operatorname{Re} \kappa^2 > 0)$ $\left(\frac{\alpha a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\sin \alpha a u}{\alpha a u} \quad (a \text{ действ. } > 0)$ $\left(\frac{2\alpha\gamma^3}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\gamma^2 + \alpha^2 u^2} \quad (\operatorname{Re} \gamma > 0)$ $\left(\frac{\alpha\gamma}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\alpha u - i\gamma} \quad (\operatorname{Re} \gamma > 0)$

Замечание. Функции четырех последних примеров нормированы на единицу:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(u)|^2 du = 1.$$

Частным случаем ($f = g$) этой теоремы является сохранение нормы

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(u)|^2 du. \quad (46)$$

§ 17. Преобразование свертки

По определению сверткой двух функций называется выражение (если оно существует):

$$f * g \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-t) g(t) dt. \quad (47)$$

Можно также определить ¹⁾ свертку двух обобщенных функций. В частности.

$$\delta * T = T \quad (T - \text{некоторая обобщенная функция}),$$

$$\delta * f = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-t) f(t) dt = f(x) \quad (f - \text{некоторая функция}).$$

Образование свертки является коммутативной операцией: $f * g = g * f$.

Имеет место следующая теорема:

Теорема V. *Свертка двух функций $f(x)$ и $g(x)$ (при условии, что она существует) имеет преобразованием Фурье выражение*

$$\sqrt{2\pi/\alpha} F(u) G(u),$$

где $F(u)$ и $G(u)$ являются преобразованиями Фурье $f(x)$ и $g(x)$ соответственно; это преобразование взаимно. В частности, имеем:

Теорема V'. *Если $f(x)$ — квадратично интегрируемая функция, $g(x)$ — абсолютно интегрируемая функция, $F(u)$ и $G(u)$ — их преобразования Фурье, то свертка $f * g$ и произведение $\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} FG$ являются квадратично интегрируемыми функциями, причем второе является преобразованием Фурье первого,*

ДОПОЛНЕНИЕ Б СПЕЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ФОРМУЛЫ

Раздел I. УРАВНЕНИЕ ЛАПЛАСА, ПОЛИНОМЫ ЛАГЕРРА, КУЛОНОВСКИЕ ФУНКЦИИ

§ 1. Уравнение Лапласа и вырожденная гипергеометрическая функция

Уравнением Лапласа называется уравнение типа

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (\beta - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (1)$$

(здесь α и β — произвольные комплексные постоянные). Решение уравнения (1) можно искать в виде степенного ряда. Обычно *вырожденной гипергеометрической функцией* называется ряд вида

$$F(\alpha, \beta; z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} \cdot \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n) \Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta+n)} \cdot \frac{z^n}{n!}. \quad (2)$$

Этот ряд:

- 1) вполне определен для произвольных α и β при $\beta \neq -p$ (p целое ≥ 0);
- 2) сходится во всей комплексной плоскости z ;
- 3) является полиномом степени p (p целое ≥ 0), если $\alpha = -p$, имеет существенно особую точку на бесконечности, если $\alpha \neq -p$;
- 4) удовлетворяет соотношению Куммера:

$$F(\alpha, \beta; z) = e^z F(\beta - \alpha, \beta; -z). \quad (3)$$

Нетрудно видеть, что если функции

$$F(\alpha, \beta; z) \text{ и } z^{1-\beta} F(\alpha - \beta + 1, 2 - \beta; z)$$

существуют¹⁾, то они являются двумя линейно независимыми решениями уравнения (1),

По методу Лапласа решения уравнения (1) могут быть также представлены в виде контурных интегралов. Если Γ некоторый контур в комплексной

¹⁾ Если β не целое, то эти две функции существуют и различны. Если $\beta = 1$, то они тождественны друг другу. Если $\beta = 0, -1, -2, \dots$, то существует только функция $z^{1-\beta} F(\alpha - \beta + 1, 2 - \beta; z)$. Если $\beta = 2, 3, \dots$, то существует только функция $F(\alpha, \beta; z)$.

плоскости t , такой, что функция $t^\alpha (1-t)^{\beta-\alpha} e^{zt}$ принимает одинаковые значения на его концах, то интеграл

$$\int_{\Gamma} e^{zt} t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-\alpha-1} dt \quad (4)$$

является частным решением уравнения (1).

Предположим, что α не целое, $\beta = b$ (b целое > 0). Замкнутому контуру Γ_0 , охватывающему точки $t=0$ и $t=1$ (рис. 38)²⁾, соответствует решение типа (4). По соглашению $\arg t - \arg(1-t) = 0$ на той части контура, где t изменяется вдоль действительной оси между 0 и 1 в направлении возрастающих t . Это решение, будучи целой функцией z , пропорционально $F(\alpha, \beta; z)$.

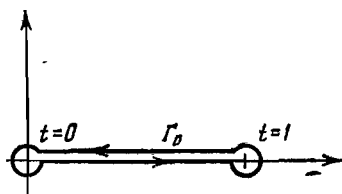


Рис. 38.

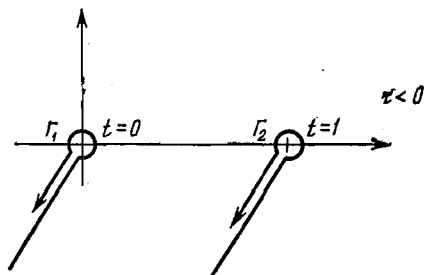


Рис. 39.

Коэффициент пропорциональности получается при разложении e^{zt} под знаком интеграла и применении формулы

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = (1 - e^{2\pi i y})^{-1} \int_{\Gamma_1} t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt \quad (5)$$

($x+y$ — целое, y не целое).

Находим

$$F(\alpha, b; z) = (1 - e^{-2\pi i \alpha})^{-1} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(b-\alpha)} \int_{\Gamma_0} e^{zt} t^{\alpha-1} (1-t)^{b-\alpha-1} dt. \quad (6)$$

Двум петлям Γ_1 и Γ_2 , обходящим точки $t=0$ и $t=1$ соответственно (рис. 39)³⁾, отвечают два решения типа (4), нерегулярные в начале, именно

$$W_r(\alpha, b; z) = (1 - e^{-2\pi i \alpha})^{-1} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(b-\alpha)} \int_{\Gamma_r} e^{zt} t^{\alpha-1} (1-t)^{b-\alpha-1} dt \quad (7)$$

($r=1, 2$).

Условие сходимости интеграла есть

$$\pi/2 < \arg z + \tau + 2n\pi < 3\pi/2$$

(τ — аргумент бесконечной точки на петлях Γ_1 и Γ_2).

²⁾ Контур Γ_0 обходится в положительном направлении.

³⁾ Γ_1 и Γ_2 проходятся в положительном направлении.

По соглашению ⁴⁾:

$$-\pi < \arg z < \pi, \quad -\pi < \tau < +\pi \quad (\text{знак } \tau = \text{знаку } \arg z).$$

В конце петли Γ_1 и в начале петли Γ_2 :

$$\begin{aligned} \arg t &= \tau, \\ \arg(1-t) &= \begin{cases} \tau - \pi, & \text{если } 0 < \tau < \pi, \\ \tau + \pi, & \text{если } -\pi < \tau < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

При этих условиях

$$W_1(b-a, b; -z) = e^{-z} W_2(a, b; z), \quad (8a)$$

$$W_2(b-a, b; -z) = e^{-z} W_1(a, b; z) \quad (8b)$$

$$\begin{aligned} (-\pi < \arg z < +\pi; \quad -\pi < \arg(-z) < +\pi); \\ F(a, b; z) &= W_1(a, b; z) + W_2(a, b; z). \end{aligned} \quad (9)$$

Асимптотические разложения решений W_1 и W_2 (они получаются методом скорейшего спуска):

$$\begin{aligned} W_1(a, b; z) \Big|_{|z| \rightarrow \infty} & \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+a)}{\Gamma(a)} \times \\ & \times \frac{\Gamma(n+a-b+1)}{\Gamma(a-b+1)} \frac{(-z)^n}{n!}, \quad (10) \\ & (-\pi < \arg(-z) < +\pi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_2(a, b; z) \Big|_{|z| \rightarrow \infty} & \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1-a)}{\Gamma(1-a)} \times \\ & \times \frac{\Gamma(n+b-a)}{\Gamma(b-a)} \cdot \frac{z^{-n}}{n!} \quad (11) \\ & (-\pi < \arg z < +\pi). \end{aligned}$$

§ 2. Полиномы Лагерра

Определение ⁵⁾:

$$\begin{aligned} L_p^0 &= e^z \frac{d^p}{dz^p} (e^{-z} z^p), \quad L_p^k = (-1)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{p+k}^0 \\ & (k, p = 0, 1, 2, \dots, \infty). \end{aligned} \quad (12)$$

⁴⁾ Это соглашение предполагает $\operatorname{Im} z \neq 0$. Чтобы определить W_1 и W_2 на действительной оси, необходимо осуществить аналитическое продолжение. При этом результаты будут различными в случаях $\operatorname{Im} z \rightarrow 0^+$ и $\operatorname{Im} z \rightarrow 0^-$.

⁵⁾ Некоторые авторы символом L_p^k обозначают полином $(-1)^k L_{p-k}^k$ в наших обозначениях.

L_p^k есть полином степени p , обладающий p нулями между 0 и $+\infty$:

$$L_p^k(z) = \frac{[(p+k)!]^2}{p!k!} F(-p, k+1; z) = \sum_{s=0}^p (-1)^s \frac{[(p+k)!]^2}{(p-s)!(k+s)!s!} z^s. \quad (13)$$

В частности, $L_0^k = k!$

Дифференциальное уравнение (Лапласа):

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (k+1-z) \frac{d}{dz} + p \right] L_p^k = 0. \quad (14)$$

Производящая функция:

$$\frac{e^{-zt}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{t^p}{(p+k)!} L_p^k(z) \quad (|t| < 1). \quad (15)$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_0^{\infty} e^{-z} z^k L_p^k L_q^k dz = \frac{[(p+k)!]^3}{p!} \delta_{pq}. \quad (16)$$

§ 3. Собственные функции водородоподобных атомов (теория Шредингера)

Введем обозначения

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{\hbar^2}{Zm'e^2},$$

a_0 — радиус орбиты Бора, Ze — заряд ядра, m' — приведенная масса электрона.

Собственные значения энергии:

$$E_n = - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{m' c^2}{2n^2} = - \frac{1}{n^2} \frac{Ze^2}{2a}.$$

Нормированные на единицу собственные функции в сферических координатах выражаются формулами:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = a^{-3/2} N_{nl} F_{nl} \left(\frac{2r}{na} \right) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (17)$$

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \quad (17a)$$

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-x^2/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \quad (176)$$

($n = 1, 2, \dots, \infty$; $l = 0, 1, \dots, n-1$; $m = -l, -l+1, \dots, l$).

Приведем также *рекуррентное соотношение* между средними значениями степеней r , относящимися к одному собственному состоянию (nlm) :

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1) a \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} [(2l+1)^2 - s^2] a^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0$$

$$(s > -2l-1);$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a}; \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2}{(2l+1) n^3 a^2};$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)] a; \quad \langle r^2 \rangle = \frac{1}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] n^2 a^2.$$

Таблица первых радиальных функций:

$$\left(\rho = \frac{r}{a}, \quad g_{nl}(\rho) = N_{nl} F_{nl} \left(\frac{2}{n} \rho \right) \right);$$

$$n=1 \quad g_{1s} = 2e^{-\rho},$$

$$n=2 \quad g_{2s} = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) e^{-\rho/2}, \quad g_{2p} = \frac{\sqrt{6}}{12} \rho e^{-\rho/2},$$

$$n=3 \quad g_{3s} = \frac{2\sqrt{3}}{9} \left(1 - \frac{2}{3} \rho + \frac{2}{27} \rho^2 \right) e^{-\rho/3},$$

$$g_{3p} = \frac{8\sqrt{6}}{27} \left(\rho - \frac{\rho^2}{6} \right) e^{-\rho/2}, \quad g_{3d} = \frac{2\sqrt{30}}{955} \rho^3 e^{-\rho/3}.$$

§ 4. Чисто кулоновская волна

Пусть $\psi_c(r)$ есть стационарная волновая функция рассеяния частицы чисто кулоновским потенциалом $ZZ'e^2/r$, $k = mv/\hbar$ — волновое число, v — начальная скорость.

Пусть также

$$\gamma = \frac{ZZ'e^2}{\hbar v}. \quad (18)$$

Тогда:

$$\psi_c = e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} F(-i\gamma, 1; ik(r-z)) = \quad (19)$$

$$= \psi_i + \psi_d, \quad (20)$$

$$\psi_i = e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} W_1(-i\gamma, 1; ik(r-z)), \quad (21)$$

$$\psi_d = e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} W_2(-i\gamma, 1; ik(r-z)). \quad (22)$$

Асимптотическая форма:

$$\psi_i \underset{k(r-z) \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz+i\gamma \ln k(r-z)} \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{ik(r-z)} + \dots \right\}, \quad (23)$$

$$\psi_d \underset{k(r-z) \rightarrow \infty}{\sim} f_c(\theta) \frac{e^{i(kr-\gamma \ln 2kr)}}{r} \left\{ 1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)} + \dots \right\}, \quad (24)$$

где

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{-i\gamma \ln \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right) + 2i\sigma_0}, \quad (25)$$

$$e^{2i\sigma_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}. \quad (26)$$

Поведение вблизи начала координат:

$$\psi_c(0) = e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \Gamma(1+i\gamma), \quad |\psi_c(0)|^2 = \frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma} - 1}. \quad (27)$$

§ 5. Сферические кулоновские функции

Дифференциальное уравнение.

В сферических координатах проблема рассеяния из § 4 приводит для каждого значения l момента импульса к *радиальному уравнению*

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\gamma k}{r} \right) \right] y_l = 0. \quad (28)$$

Сферические кулоновские функции являются частными решениями этого уравнения. Это функции аргумента $\rho = kr$. Они зависят от энергии частицы через k и γ . Определяют регулярное ($\sim r^{l+1}$) в начале решение $F\gamma(\gamma, kr)$ и нерегулярные решения G_l , $u_l^{(+)}$ и $u_l^{(-)}$ (сингулярность типа $1/r^l$).

При помощи замены

$$z = -2i\rho, \quad y_l = e^{i\rho} \rho^{l+1} v_l$$

уравнение (28) сводится к уравнению Лапласа:

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (2l+2-z) \frac{d}{dz} - (l+1+i\gamma) \right] v_l = 0,$$

регулярное в начале решение $F(l+1+i\gamma, 2l+2; z)$ и два нерегулярных решения $W_{1,2}(l+1+i\gamma, 2l+2; z)$ которого нам известны.

Определения и соотношения между функциями:

$$\begin{aligned} F_l(\gamma; \rho) &= c_l e^{i\rho} \rho^{l+1} F(l+1+i\gamma, 2l+2; -2i\rho) = \\ &= c_l e^{-i\rho} \rho^{l+1} F(l+1-i\gamma, 2l+2; 2i\rho), \end{aligned} \quad (296)$$

$$u_l^{(\pm)}(\gamma; \rho) = \pm 2ie^{\mp i\sigma_l} c_l e^{\pm i\rho} \rho^{l+1} W_1(l+1 \pm i\gamma, 2l+2; \mp 2i\rho) = \quad (30a)$$

$$= \pm 2ie^{\mp i\sigma_l} c_l e^{\mp i\rho} \rho^{l+1} W_2(l+1 \mp i\gamma, 2l+2; \pm 2i\rho), \quad (306)$$

$$G_l(\gamma; \rho) = \frac{1}{2} (u_l^{(+)} e^{i\sigma_l} + u_l^{(-)} e^{-i\sigma_l}). \quad (31)$$

Величины c_l и σ_l (кулоновский фазовый сдвиг) являются следующими функциями γ :

$$c_l = 2^l e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \frac{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}, \quad \sigma_l = \arg \Gamma(l+1+i\gamma) \quad (32)$$

или:
для $l = 0$

$$c_0 = \left(\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma} - 1} \right)^{1/2}, \quad \sigma_0 = \arg \Gamma(1 + i\gamma), \quad (32a)$$

для $l \neq 0$

$$c_l = \frac{c_0}{(2l+1)!!} \cdot \prod_{s=1}^l \left(1 + \frac{\gamma^2}{s^2} \right)^{1/2}, \quad \sigma_l = \sigma_0 + \sum_{s=1}^l \operatorname{arctg} \frac{\gamma}{s}. \quad (32b)$$

F_l и G_l вещественны,

$$u_l^{(-)} = u_l^{(+)*},$$

$$F_l = \frac{1}{2l} \left(u_l^{(+)} e^{i\sigma_l} - u_l^{(-)} e^{-i\sigma_l} \right), \quad (33)$$

$$u_l^{(\pm)} = e^{\mp i\sigma_l} (G_l \pm iF_l). \quad (34)$$

Асимптотические формы ($r \rightarrow \infty$, $\rho \gg l(l+1) + \gamma^2$):

$$F_l \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(\rho - \gamma \ln 2\rho - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l \right), \quad (35)$$

$$G_l \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \cos \left(\rho - \gamma \ln 2\rho - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l \right), \quad (36)$$

$$u_l^{(+)} \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \exp \left[i \left(\rho - \gamma \ln 2\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \quad (\text{расходящаяся волна}), \quad (37)$$

$$u_l^{(-)} \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \exp \left[-i \left(\rho - \gamma \ln 2\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \quad (\text{сходящаяся волна}). \quad (38)$$

Поведение вблизи начала координат ($r \rightarrow 0$):

$$F_l \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} c_l \rho^{l+1} \left[1 + \frac{\gamma}{l+1} \rho + \dots \right], \quad (39)$$

$$G_l \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2l+1)c_l} \rho^{-l} \left[1 + \begin{cases} O(\gamma \rho \ln \rho), & \text{если } l=0; \\ O\left(\frac{\gamma}{l} \rho\right), & \text{если } l \neq 0. \end{cases} \right] \quad (40)$$

Общее поведение функции F_l .

Когда ρ растет от 0 до ∞ , функция F_l растет сначала как ρ^{l+1} , затем все быстрее (экспоненциально) до точки $\rho = \gamma + \sqrt{\gamma^2 + l(l+1)}$, затем функция бесконечно осциллирует между двумя экстремальными значениями, которые асимптотически стремятся к $+1$ и -1 ; период осцилляций асимптотически стремится к 2π .

Рекуррентные формулы:

$$(2l+1) \left[\gamma + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] F_l = \\ = l \sqrt{\gamma^2 + (l+1)^2} F_{l+1} + (l+1) \sqrt{\gamma^2 + l^2} F_{l-1} \quad (l \neq 0), \quad (41)$$

$$\left(1 + \frac{\gamma^2}{l^2} \right)^{1/2} F_{l-1} = \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} + \frac{\gamma}{l} \right) F_l \quad (l \neq 0), \quad (42)$$

$$\left(1 + \frac{\gamma^2}{l^2} \right)^{1/2} F_l = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} + \frac{\gamma}{l} \right) F_{l-1} \quad (l \neq 0). \quad (43)$$

Эти соотношения остаются справедливыми, если заменить F_l на $U_l = aF_l + bG_l$ (a, b — произвольно выбранные коэффициенты, не зависящие от l).

Определитель Вронского для функций G_l и F_l равен

$$G_l \frac{dF_l}{d\rho} - F_l \frac{dG_l}{d\rho} = 1, \quad (44)$$

откуда ($l \neq 0$)

$$G_l F_{l-1} - F_l G_{l-1} = \frac{l}{\sqrt{l^2 + \gamma^2}}. \quad (45)$$

Если $\gamma = 0$, то с точностью до множителя ρ получаем сферические функции Бесселя:

$$\begin{aligned} F_l(0; \rho) &= \rho j_l(\rho), & G_l(0; \rho) &= \rho n_l(\rho), \\ u_l^{(+)}(0; \rho) &= \rho h_l^{(+)}(\rho), & u_l^{(-)}(0; \rho) &= \rho h_l^{(-)}(\rho) \end{aligned} \quad (46)$$

(определение $j_l, n_l, h_l^{(\pm)}$ см. в следующем разделе).

Раздел II. СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ БЕССЕЛЯ

§ 6. Сферические функции Бесселя

Дифференциальное уравнение.

В сферических координатах уравнение Шреддингера для свободной частицы для каждого значения l момента импульса приводит к *радиальному уравнению*⁶⁾

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f_l = \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f_l = 0. \quad (47)$$

В комплексной плоскости f_l имеет существенно особую точку в бесконечности и, в общем случае, полюс порядка $l+1$ в начале $\rho = 0$.

Сферические функции Бесселя являются частными решениями этого уравнения; они определяют регулярную ($\sim r^l$) в начале функцию j_l (собственно сферическую функцию Бесселя) и нерегулярные решения n_l (функция Неймана), $h_l^{(+)}$ (функция Ганкеля первого рода) и $h_l^{(-)}$ (функция Ганкеля второго рода).

Определение⁷⁾:

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho} \right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho), \quad n_l(\rho) = (-1)^l \left(\frac{\pi}{2\rho} \right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho),$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = n_l(\rho) \pm i j_l(\rho)$$

(J_ν обозначает обычную функцию Бесселя порядка ν); j_l и n_l вещественны,

$$h_l^{(-)} = h_l^{(+)*}. \quad (48)$$

⁶⁾ Уравнение (28) для частного случая $\gamma = 0$ получается при $\rho = kr$, $y_l = kr f_l(kr)$.

⁷⁾ Большинство авторов символом n_l обозначают ту же самую функцию, но с противоположным знаком, а в качестве сферических функций Ганкеля первого и второго рода принимают соответственно функции

$$h_l^{(1)} = -i h_l^{(+)} \text{ и } h_l^{(2)} = i h_l^{(-)}.$$

В явном виде:

$$j_l = R_l \frac{\sin \rho}{\rho} + S_l \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad n_l = R_l \frac{\cos \rho}{\rho} - S_l \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (49)$$

$$h_l^{(\pm)} = (R_l \pm iS_l) \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}.$$

Здесь R_l — полином по $1/\rho$ степени l с вещественными коэффициентами и четностью $(-1)^l$; S_l — полином по $1/\rho$ степени $l-1$ с вещественными коэффициентами и четностью $(-1)^{l-1}$,

$$R_l + iS_l = \sum_{s=0}^l \frac{i^{s-l}}{2^s s!} \cdot \frac{(l+s)!}{(l-s)!} \rho^{-s}, \quad (50)$$

$$j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0 = \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad h_0^{(\pm)} = \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho},$$

$$j_1 = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad n_1 = \frac{\cos \rho}{\rho^2} + \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad h_1^{(\pm)} = \left(\frac{1}{\rho^2} \mp \frac{l}{\rho} \right) e^{\pm i\rho}.$$

Асимптотические формы ($\rho \rightarrow \infty$, $\rho \gg l(l+1)$):

$$j_l \sim \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l \sim \frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad (51)$$

$$h_l^{(\pm)} \sim \frac{1}{\rho} \exp \left[\pm i \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \left[1 \pm i \frac{l(l+1)}{2\rho} - \dots \right].$$

Поведение вблизи начала координат ($\rho \rightarrow 0$):

$$j_l \sim \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \left[1 - \frac{\rho^2}{2(2l+3)} + \dots \right], \quad (52)$$

$$n_l \sim \frac{(2l+1)!!}{2l+1} \left(\frac{1}{\rho} \right)^{l+1} \left[1 + \frac{\rho^2}{2(2l-1)} + \dots \right].$$

Общее поведение j_l .

При возрастании ρ_{l+1} от 0 до $+\infty$ функция ρj_l сначала растет как ρ^{l+1} , затем все быстрее (экспоненциально) до точки $\rho = \sqrt{l(l+1)}$, затем она бесконечно осциллирует между двумя экстремальными значениями, которые асимптотически стремятся к $+1$ и -1 соответственно. Асимптотическая формула (51) является хорошим приближением, когда $\rho \gg l(l+1)/2$, однако амплитуда осцилляций практически достигает своего асимптотического значения (с точностью до 10%) уже при $\rho \geq 2l$.

Рекуррентные формулы.

Нижне будем считать, что $f_l \equiv a_j + b n_l$, где a и b — произвольно выбранные коэффициенты, не зависящие от l . Имеем ($l \neq 0$):

$$(2l+1)f_l = \rho [f_{l+1} + f_{l-1}], \quad (53)$$

$$f_{l-1} = \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \right] f_l = \frac{1}{\rho^{l+1}} \frac{d}{d\rho} (\rho^{l+1} f_l), \quad (54)$$

$$f_l = \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l-1}{\rho} \right] f_{l-1} = -\rho^{l-1} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{f_{l-1}}{\rho^{l-1}} \right), \quad (55)$$

так что

$$f_l = \left[\rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \right] f_0. \quad (56)$$

Определитель Вронского:

$$\rho^2 \left[n_l \left(\frac{d}{d\rho} j_l \right) - j_l \left(\frac{d}{d\rho} n_l \right) \right] = 1, \quad (57)$$

откуда ($l \neq 0$)

$$\rho^2 [n_l j_{l-1} - j_l n_{l-1}] = 1. \quad (58)$$

Раздел III. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР И ПОЛИНОМЫ ЭРМИТА

§ 7. Полиномы Эрмита

Определение:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \left(\frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, \infty); \quad (59)$$

H_n есть полином степени n четности $(-1)^n$, обладающий n нулями:

$$H_n(z) = \begin{cases} (-1)^p \frac{(2p)!}{p!} F\left(-p, \frac{1}{2}; z^2\right), & \text{если } n = 2p; \\ (-1)^p 2 \frac{(2p+1)!}{p!} z F\left(-p, \frac{3}{2}; z^2\right), & \text{если } n = 2p+1. \end{cases} \quad (60)$$

Дифференциальное уравнение:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + 2n \right] H_n(z) = 0. \quad (61)$$

Производящая функция:

$$e^{-s^2+2sz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(z). \quad (62)$$

Рекуррентные соотношения:

$$\frac{d}{dz} H_n = 2n H_{n-1}, \quad (63)$$

$$\left(2z - \frac{d}{dz} \right) H_n = H_{n-1}, \quad (64)$$

$$2z H_n = H_{n+1} + 2n H_{n-1}. \quad (65)$$

Явные выражения шести первых полиномов Эрмита:

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, & H_1 &= 2z, \\ H_2 &= 4z^2 - 1, & H_3 &= 8z^3 - 12z, \\ H_4 &= 16z^4 - 48z^2 + 12, & H_5 &= 32z^5 - 160z^3 + 120z. \end{aligned}$$

§ 8. Собственные функции гармонического осциллятора

$u_n(Q)$ есть собственная функция, нормированная на единицу и принадлежащая собственному значению $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ ($n = 0, 1, \dots, \infty$); фаза выбирается так, чтобы выполнялось соотношение (68), и чтобы $u_0(0)$ была вещественной и положительной.

Уравнение на собственные значения ($Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q$):

$$\frac{1}{2} \left(Q^2 - \frac{d^2}{dQ^2} \right) u_n(Q) = \left(n + \frac{1}{2} \right) u_n(Q).$$

Производящая функция:

$$\pi^{-1/4} e^{-Q^2/2} e^{-t^2/2 + \sqrt{2} Q t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\sqrt{n!}} u_n(Q). \quad (66)$$

Соотношения ортонормированности и замкнутости:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_n u_p dQ = \delta_{np},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n^*(Q) u_n(Q') = \delta(Q - Q').$$

Рекуррентные соотношения:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{d}{dQ} \right) u_n = \sqrt{n} u_{n-1}, \quad (67)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right) u_n = \sqrt{n+1} u_{n+1}, \quad (68)$$

$$Q u_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}} u_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} u_{n-1}. \quad (69)$$

Четность:

$$u_n(-Q) = (-1)^n u_n(Q).$$

Выражение через полиномы Эрмита:

$$u_n = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} e^{-Q^2/2} H_n(Q). \quad (70)$$

Раздел IV. ПОЛИНОМЫ И ФУНКЦИИ ЛЕЖАНДРА, СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

§ 9. Полиномы и функции Лежандра

Определения:

Полином Лежандра

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (l = 0, 1, 2, \dots, \infty) \quad (71)$$

есть полином степени l , четности $(-1)^l$, обладающий l нулями в интервале $(-1, +1)$.

Функция Лежандра

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) = \frac{(1-u^2)^{m/2}}{2^l \cdot l!} \frac{d^{l+m}}{du^{l+m}} (u^2-1)^l \quad (72)$$

$$(-1 \leq u \leq +1; \quad l=0, 1, 2, \dots, \infty; \quad m=0, 1, \dots, l)$$

есть произведение $(1-u^2)^{m/2}$ на полином степени $l-m$ и четности $(-1)^{l-m}$, обладающий $l-m$ нулями в интервале $(-1, +1)$. В частности,

$$\begin{aligned} m=l \quad P_l^l &= (2l-1)!! (1-u^2)^{l/2}, \\ m=0 \quad P_l^0 &= P_l(u); \end{aligned} \quad (73)$$

$P_l(u)$ есть частный случай функции Лежандра

Дифференциальное уравнение:

$$\left[(1-u^2) \frac{d^2}{du^2} - 2u \frac{d}{du} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-u^2} \right] P_l^m = 0. \quad (74)$$

Производящие функции:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(u), \quad (75)$$

$$(2m-1)!! (1-u^2)^{m/2} \frac{t^m}{[1-2tu+t^2]^{m+1/2}} = \sum_{l=m}^{\infty} t^l P_l^m(u) \quad (|t| < 1) \quad (76)$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_{-1}^{+1} P_k^m P_l^m du = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{kl}. \quad (77)$$

Рекуррентные соотношения:

$$(2l+1) u P_l^m = (l+1-m) P_{l+1}^m + (l+m) P_{l-1}^m, \quad (78)$$

$$(1-u^2) \frac{d}{du} P_l^m = -l u P_l^m + (l+m) P_{l-1}^m = \quad (79)$$

$$= (l+1) u P_l^m - (l+1-m) P_{l+1}^m \quad (80)$$

(соотношения верны и при $l=0$, если принять $P_{-1}=0$).

Частные значения

$$P_l(1) = 1, \quad P_l(-1) = (-1)^l,$$

$$P_l^m(1) = P_l^m(-1) = 0 \quad (m \neq 0),$$

$$P_l^m(0) = \begin{cases} (-1)^p \frac{(2p+2m)!}{2^l p! (p+m)!}, & \text{если } l-m=2p; \\ 0, & \text{если } l-m=2p+1. \end{cases} \quad (81)$$

Первые пять полиномов Лежандра:

$$P_0 = 1, \quad P_1 = u, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3u^2 - 1),$$

$$P_3 = \frac{1}{2}(5u^3 - 3u), \quad P_4 = \frac{1}{8}(35u^4 - 30u^2 + 3),$$

§ 10. Сферические функции

Операторы L_x, L_y, L_z в сферических координатах. Операторы L_x, L_y, L_z являются дифференциальными эрмитовыми операторами, определенными (в системе единиц, где $\hbar = 1$) формулой

$$\mathbf{L} = -i [\mathbf{r} \nabla].$$

В качестве полярной оси выбираем Oz ; (r, θ, φ) — сферические координаты точки r ; $\Omega = (\theta, \varphi)$ обозначает совокупность двух угловых координат ($\varphi = 0$ есть плоскость zOx , $\varphi = \pi/2$ — плоскость zOy). Элемент телесного угла есть $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$.

В сферических координатах имеем:

$$L_z = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (82)$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (83)$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (84)$$

Определение сферических функций $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Общие собственные функции операторов L^2 и L_z :

$$L^2 Y_l^m = l(l+1) Y_l^m, \quad (85)$$

$$L_z Y_l^m = m Y_l^m \quad (86)$$

$$(l=0, 1, 2, \dots, \infty; \quad m=-l, -l+1, \dots, +l).$$

Завершают определения условия:

а) Y_l^m нормированы на единицу на сфере радиуса 1;

б) фазы выбраны так, чтобы удовлетворялись рекуррентные соотношения (89) и чтобы $Y_l^0(0, 0)$ была действительной и положительной величиной.

Соотношения ортонормированности и замкнутости:

$$\int Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{mm'} \delta_{ll'}, \quad (87)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')}{\sin \theta} = \delta(\Omega - \Omega'). \quad (88)$$

Функции Y_l^m образуют полную ортонормированную систему квадратично интегрируемых функций на сфере радиуса 1.

Рекуррентные соотношения:

$$L_{\pm} Y_l^m = [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_l^{m \pm 1} = [(l \mp m)](l+1 \pm m)^{1/2} Y_l^{m \pm 1}, \quad (89)$$

$$\cos \theta Y_l^m = \left[\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} Y_{l+1}^m + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)} \right]^{1/2} Y_{l-1}^m. \quad (90)$$

Четность при пространственном отражении $(\theta, \varphi) \rightarrow (\pi - \theta, \varphi + \pi)$:

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (91)$$

Комплексное сопряжение:

$$Y_l^{m*}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi). \quad (92)$$

Связь с функциями Лежандра ($m \geq 0$):

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (93)$$

Таким образом, Y_l^m есть произведение $e^{im\varphi} \sin^{|m|}\theta$ на полином степени $l - |m|$ и четности $(-1)^{l-m}$ от $\cos \theta$. В частности,

$$m=0 \quad Y_l^0 = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (94)$$

$$m=l \quad Y_l^l = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2} \right]^{1/2} \sin^l \theta e^{il\varphi}. \quad (95)$$

Гармонические полиномы и сферические функции.

Однородные полиномы степени l от x, y, z

$$\mathcal{Y}_l^m(\mathbf{r}) \equiv r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (m = -l, -l+1, \dots, +l) \quad (96)$$

образуют последовательность $2l+1$ линейно независимых гармонических полиномов степени l ⁸⁾:

$$\Delta \mathcal{Y}_l^m(\mathbf{r}) = 0. \quad (97)$$

⁸⁾ Формула (97) следует из операторного соотношения, верного для всякой функции, ограниченной при $r = 0$:

$$\Delta \equiv \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}.$$

По определению полином $h(x, y, z)$ есть гармонический полином, если он однороден по x, y, z и удовлетворяет уравнению $\Delta h = 0$; существует $2l+1$ линейно независимых полиномов.

Несколько первых сферических функций:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta),$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}, \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi},$$

$$Y_3^1 = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi},$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}, \quad Y_3^2 = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2i\varphi},$$

$$Y_3^3 = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{3i\varphi}.$$

Раздел V РАЗЛОЖЕНИЯ И РАЗЛИЧНЫЕ ФОРМУЛЫ

Теорема сложения:

$$\frac{2l+1}{4\pi} \cdot P_l(\cos \alpha) = \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_l^m(\theta_2, \varphi_2) \quad (98)$$

(α — угол между направлениями (θ_1, φ_1) и (θ_2, φ_2)).

Функции Грина операторов Δ и $\Delta + k^2$):

$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \alpha), \quad (99)$$

$$\frac{e^{ik|r_1 - r_2|}}{|r_1 - r_2|} = k \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr_{<}) h_l^{(+)}(kr_{>}) P_l(\cos \alpha), \quad (100)$$

$$\frac{\cos(k|r_1 - r_2|)}{|r_1 - r_2|} = k \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr_{<}) n_l(kr_{>}) P_l(\cos \alpha) \quad (101)$$

(α — угол между направлениями r_1 и r_2 ; $r_{<}$ — меньшая из длин r_1 и r_2 , $r_{>}$ — большая из длин r_1 и r_2).

Формулы (100) и (101) верны при любых k , в том числе и при комплексных k .

$$\Delta \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(r), \quad (\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi \delta(r),$$

$$(\Delta + k^2) \frac{\cos kr}{r} = -4\pi \delta(r).$$

Разложение плоской волны и чисто кулоновской волновой функции рассеяния.

Полярная ось направлена по оси z , совпадающей с направлением начального волнового вектора k :

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (102)$$

$$\psi_c = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma; kr) P_l(\cos \theta), \quad (103)$$

$$f_c(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\sigma_l} \sin \sigma_l P_l(\cos \theta). \quad (104)$$

Определения γ , ψ_c , $f_c(\theta)$, F_l , σ_l даны в § 4 и 5 (уравнения (18), (19), (25), (29) и (32)).

При другом выборе полярной оси разложения (102), (103) и (104) остаются верными, если под θ подразумевать угол между направлениями k и r .

Пользуясь теоремой сложения, можно получить разложения по сферическим функциям от аргументов (θ_k, φ_k) и (θ_r, φ_r) . Например,

$$e^{ikr} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\theta_k, \varphi_k) Y_l^m(\theta_r, \varphi_r). \quad (105)$$
