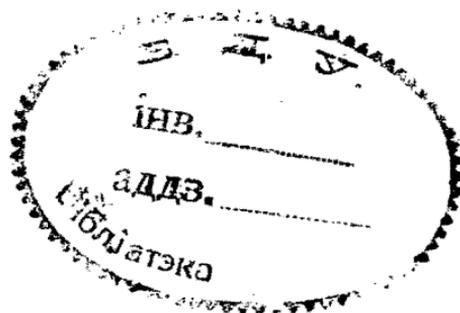


Дар
СУВОРОВА С.Г.
Заместителя
главного редактора журнала
«Успехи физики»

ОСНОВАНИЯ НОВОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

СБОРНИК СТАТЕЙ
ПОД РЕДАКЦИЕЙ И С ПРЕДИСЛОВИЕМ
АКАДЕМИКА А. Ф. ИОФФЕ



НАУЧНАЯ
БИБЛИОТЕКА
МИФИ



ГОСУДАРСТВЕННОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКВА 1927 ЛЕНИНГРАД



Всего - 12102
ФРК - 12102
/

Гиз № 18413/л.
Ленинградский Гублит № 25986.
8 л. Тираж 2500 экз.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Противоречия между волновыми свойствами света, проявляющимися в интерференции и дифракции, и атомными его свойствами, так отчетливо выступающими в явлениях фото-эффекта и комптоновского рассеяния, казались неустранимыми. С одной стороны, свет— это волна, разливающаяся во все стороны по бесконечному морю эфира. С другой стороны, это — атом, летящий подобно пуле в одну определенную сторону.

Постоянные неудачи попыток примирить эти две точки зрения создавали даже подчас у глубочайших мыслителей (Бор) настроение безнадежности, которое заставляло их опасаться, что, быть может, задача о свете и вовсе не разрешима в рамках нашего пространственно-временного мира. Однако в это же время, примерно год тому назад, появилась новая струя в теории квантов, которая внесла некоторый просвет в эту безнадежность. Оказалось (Гейзенберг), что можно свести все известные факты без противоречий в одну стройную систему, правда, чисто формальную, но охватывающую все свойства атома. Вскоре Борн нашел адекватную этой системе математическую формулировку (матрицы), которая открывала путь к решению проблемы атома. Представление об электроны, как о быстро вращающемся волчке, дополнило модель атома, устранив оставшееся еще расхождение с опытом, как, напр., в величине отношения механического момента вращения к магнитному моменту намагниченного тела, в вопросе о происхождении дублетов в спектральных сериях и т. п. Однако физическая мысль новой квантовой систематики оставалась темной, и основной вопрос о возможности согласования волновой и атомной структуры света оставался не разрешенным. Де-Брольи и Эйнштейн указывали путь примирения волн света с атомами света в предположении, что всякий атом и в частности всякий электрон, из которых атомы построены, одновременно представляет собой и какое-то волновое состояние в окружающем эфире. Эти идеи при-

ведены были в систему в «Новой механике» Шредингера. Вместо стремления объяснить свет, исходя из механики материальной точки и из механики электромагнитного поля, Шредингер устанавливает новые принципы, охватывающие движение точки и волны как частные случаи. Оказывается, что эта именно новая механика охватывает и всю теорию квантов и приводит к той самой теории матриц, к которой Гейзенберг и Борн пришли уже раньше. Впервые за 25 лет со времени появления квантов Планка показалась надежда понять их, ввести в систему прежней механики и оптики. Пока новая механика не проверена на всей области известных нам явлений физики, нельзя еще считать ее твердо установленной. Но большое число удачных совпадений заставляет верить, что мы на правильном пути. Синтез движения точки и волны — это большое завоевание физической мысли, которое, несомненно, определит ее судьбы и на будущее время. Теория Шредингера подвергнется еще, вероятно, значительным изменениям, и надо думать, что для нее найдется и более ясное конкретное физическое толкование. Но она будет исходной точкой того, что придет дальше.

При таком значении этих новых взглядов, как новой эпохи, открывающейся в физике, и при той роли, которую она играет в системе миропонимания, очень важно еще сейчас, когда эта новая эпоха только начинается, сделать ее достоянием возможно широких кругов как физиков, так и всех ею интересующихся. Настоящая книжка и ставит себе эту задачу. Конечно, изучение этого вопроса требует некоторого труда, углубления в новые представления и овладения математическим аппаратом, который упрощен здесь настолько, насколько это позволяет самая задача. Зато всякий, разобравшийся в этой книжке, будет в состоянии следить за дальнейшим развитием новой механики, а быть может, и пользоваться ею, где это окажется нужным.

ЗАТРУДНЕНИЯ ТЕОРИИ КВАНТОВ ДО «НОВОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ»

П. С. ТАРТАКОВСКИЙ

Задача этой вводной статьи предлагаемого сборника — наметить основные вехи на пути развития теории квантов со времени первых работ Бора (1913). Одержав ряд крупных побед, теория квантов потеряла в последнее время также и ряд неудач, которые обнаружили в целом ряде случаев принципиальную неприменимость ее методов и даже всего логического строя теории. В поисках новых путей теория квантов шла ощупью, часто ограничиваясь простой систематикой экспериментальных фактов. И только в самое последнее время, около года тому назад, найдена новая точка зрения и проложен путь для дальнейшего развития теории квантов.

§ 1. В применении к атомной системе та форма теории квантов, которую теперь уже можно назвать классической, основана на следующих основных постулатах.

1. *Постулат устойчивых состояний*. Из всех механически возможных состояний атомной системы «устойчив», т.-е. реально осуществим, только ряд дискретных состояний, выделяемый при помощи особых «квантовых» условий. Последние пишутся в форме

$$[1] \quad J_r = n_r h,$$

где J_r — так называемые фазовые интегралы, n_r — *целые* числа, h — постоянная Планка.

2. *Условие частот*. Если при переходе из устойчивого состояния с энергией E' в устойчивое состояние с меньшей энергией E'' происходит излучение, то излучаемый свет монохроматичен, и частота его определяется условием

$$[2] \quad h\nu = E' - E''.$$

Иначе говоря, излучается один квант лучистой энергии, величина которого равна теряемой атомом энергии.

То же самое условие частот [2] определяет и поглощение энергии, а именно: поглощается квант энергии, величина которого равна разности между конечным и начальным состоянием системы.

Эти два основных постулата являются выражением ряда экспериментальных фактов.

Постулат устойчивых состояний выражает то, что атомы могут существовать в определенных состояниях значительное время не разрушаясь (из всех устойчивых состояний — одно, именно состояние с наименьшей энергией, является наиболее устойчивым — нормальным; в нем атом может существовать неопределенно долгое время). Согласно классической электродинамике это невозможно, так как электрон, двигаясь с ускорением, непрерывно излучает энергию; следовательно, состояния атома с постоянной энергией вообще невозможны.

Постулат частот является основой для выражения закономерностей в спектрах; в частности уравнение [2] выражает так называемый комбинационный принцип, согласно которому частоты всех линий данного спектра могут быть представлены в виде разностей двух «термов». Уравнение [2] показывает, что величины термов пропорциональны значениям энергии атома в тех состояниях, переходом между которыми осуществляется данная спектральная линия.

Условие частот явилось логически последовательным обобщением уравнения Эйнштейна для фото-электрического эффекта, выражающего энергию фото-электрона:

$$[3] \quad E = h\nu - P.$$

К этим двум постулатам присоединяется третий — так называемый *принцип соответствия*.

В предельных случаях больших квантовых чисел квантовая теория атома и классическая электродинамика приводят к совпадающим результатам, расходясь в непредельных случаях. Содержание принципа соответствия заключается в том, что это совпадение признается не случайным; между реальными фактами, выражаемыми квантовой теорией, и описанием явлений с классической точки зрения существует известное «соответствие», в предельных случаях переходящее в совпадение. Ряд величин, описывающих определенные стороны явлений с классической точки зрения, дают приближенное понятие об этих сторонах явлений и в непредельных случаях, когда

классическая теория заведомо неприменима. В виду различия точек зрения классической и квантовой теории на самый механизм явлений, физическое толкование этих величин, конечно, неодинаковое. Таким образом, принцип соответствия существенно дополняет два основных постулата, давая возможность сделать заключения о тех свойствах излучения, которые двумя основными постулатами не выражаются (например, интенсивность и поляризация спектральных линий).

Из сказанного вытекает, что весь путь решения какой-либо задачи физики атома состоит в следующем:

1. Движение атомной системы (модель выбирается на основании каких-либо предварительных данных) описывается при помощи уравнений обычной механики.

2. Из всех механически возможных состояний квантовыми условиями выделяется дискретный ряд устойчивых состояний. Определяется выражение энергии устойчивых состояний, как функция квантовых чисел.

3. Применение условия частот дает спектр системы.

4. Применение принципа соответствия определяет интенсивности и поляризацию спектральных линий.

§ 2. *Выделение устойчивых состояний.* Если движение атомной системы описывается обобщенными координатами q_i и импульсами p_i , связанными каноническими уравнениями

$$[4] \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}; \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (i = 1, \dots, s)$$

[$H(p, q)$ — Гамильтонова функция], то наиболее удобным для теории квантов методом решения механической задачи является метод Гамильтона-Якоби. Согласно этому методу вводится такая функция S (так называемое «действие»), что

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i};$$

тогда интеграл энергии дает уравнение в частных производных первого порядка для функции S , так называемое уравнение Гамильтона-Якоби.

$$[5] \quad H(p_i, q_i) = H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = E.$$

Интегрированием этого уравнения механическая задача решается до конца. Для установления устойчивых состояний это, впрочем, не представляется необходимым.

Как указал Бор, установление устойчивых состояний возможно лишь в том случае, если система обладает определенными свойствами периодичности (класс так называемых условно-периодических систем). Определенное правило для выделения устойчивых состояний получается в том случае, когда уравнение Гамильтона-Якоби интегрируется разделением переменных, т.-е. когда каждый импульс p_i является функцией только соответствующей координаты q_i :

$$[6] \quad p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} = f'_i(q_i).$$

В этом случае квантовые условия пишутся в форме:

$$[7] \quad J_i = \oint p_i dq_i = n_i h. \quad (i = 1, \dots, s)$$

Интегрирование распространяется на всю область изменения координаты q_i , т.-е. на один полный оборот в случае циклической координаты q_i и на одно полное колебание в случае «либрационного» характера движения. Очевидно, что только в случае разделения переменных имеет смысл применение квантовых условий типа [7].

Это обстоятельство привело к мысли, что каждая задача имеет свою «естественную» для нее координатную систему, именно ту, в которой происходит разделение переменных и, следовательно, возможно установление дискретных состояний. Однако возможны случаи, когда установление такой координатной системы невозможно и, следовательно, установить устойчивые состояния нельзя. Выражение энергии как функции квантовых чисел n_i и дает окончательное решение задачи.

С теоретической точки зрения удобно установление устойчивых состояний при помощи так называемых угловых координат, так как при этом ясно выступает связь квантовых условий со свойствами периодичности системы.

Контактным преобразованием координаты p_i, q_i могут быть заменены такой системой координат w_i и сопряженных импульсов J_i , что все координаты q_i являются периодическими функциями w_i с периодом 1:

$$[8] \quad q_i = \sum C_{\tau_1} \dots \tau_u \cos 2\pi (\tau_1 w_1 + \dots + \tau_u w_u + \gamma_i),$$

а энергия системы, т.-е. Гамильтонова функция, зависит только от импульсов J_i :

$$H = H(J_1, \dots, J_u).$$

Число u называется степенью периодичности системы. Из гамильтоновых уравнений следует:

$$[9] \quad \dot{J}_i = -\frac{\partial H}{\partial w_i} = 0; \quad \dot{w}_i = \frac{\partial H}{\partial J_i} = \omega_i,$$

следовательно:

$$J_i = \text{Const.}, \quad w_i = \omega_i t + \delta_i. \quad (i = 1, \dots, u)$$

Импульсы J_i постоянны, координаты w_i линейные функции времени. Импульсы J_i как раз равны фазовым интегралам [7] — и мы можем, таким образом, просто положить:

$$[10] \quad J_i = n_i h. \quad (i = 1, \dots, u)$$

Мы видим, следовательно, что число независимых квантовых условий равно степени периодичности системы u . Если $u < s$ (числа степеней свободы), то система называется «вырожденной». Число «независимых» квантовых чисел для нее меньше числа степеней свободы. Точно также существование линейных зависимостей между частотами ω_i типа

$$m_1 \omega_1 + \dots + m_u \omega_u = 0$$

понижает степень периодичности u и уменьшает число квантовых условий. Существование зависимостей этого типа и есть признак «вырождения» системы.

Остановимся на установлении квантовых состояний в том случае, когда на систему действуют внешние силы, малые по сравнению с силами, действующими внутри системы. В этом случае движение системы определяется так называемым *методом возмущений*. Сперва решается задача о невозмущенном движении, определяется энергия системы H , как функция импульсов J_i . Однако в возмущенном движении величины J_i перестают быть постоянными. Мы рассматриваем потенциал возмущающих сил сперва как функцию импульсов невозмущенного движения, а затем находим новые импульсы J'_i , которые уже оказываются постоянными. Энергия возмущенной системы складывается из энергии невозмущенной системы и энергии возмущения:

$$[11] \quad H' = H + \varepsilon \Omega,$$

где Ω потенциал возмущающих сил, а ε — малый коэффициент.

Если система была вырожденной, а возмущающие силы имеют периодический характер, то степень периодичности системы может

увеличиться: появятся новые импульсы и новые квантовые числа. Если новые периоды велики по сравнению со старыми (как это имеет место, например, в случае эффекта Зеемана), то задача решается по методу вековых возмущений; вместо Ω в формуле [11] подставляется среднее значение энергии возмущения, взятое по периоду невозмущенного движения.

Мы должны еще указать на то обстоятельство, что величины, подлежащие квантованию, должны быть «адиабатическими инвариантами», т.-е. не менять своего значения, например, при медленном включении внешнего силового поля, при «адиабатическом» преобразовании системы. Этому условию как раз удовлетворяют фазовые интегралы [7].

§ 3. *Условие частот и принцип соответствия.* После того как устойчивые состояния системы установлены, спектр системы определяется автоматически путем применения условия частот. Но при этом возможно получение некоторых линий, в действительности не наблюдающихся. Устранение этих линий происходит при помощи «правил отбора», вытекающих из принципа соответствия.

Математическая формулировка принципа соответствия следующая.

Всякая из координат системы, а также общее смещение электрона, а стало-быть и электрический момент системы, могут быть выражены в виде разложения в ряд Фурье:

$$[12] \quad \xi = \sum C_{\tau_1 \dots \tau_u} \cos 2\pi[(\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_u \omega_u) t + \gamma_\tau],$$

где суммирование происходит по всевозможным комбинациям целых чисел τ_i . С точки зрения классической теории, спектр системы определяется «механическими» частотами ω_i и их комбинациями:

$$\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_u \omega_u,$$

при чем интенсивности соответствующих линий задаются квадратами амплитуд C_τ . Если для какой-либо комбинации амплитуда $C_\tau = 0$, то соответствующая линия в спектре отсутствует. Очевидно, что и поляризация излучения определяется наличием определенных членов в разложении ряда Фурье слагающей электрического момента по известному направлению. С точки зрения теории квантов, одновременного излучения всего спектра не происходит; отдельному переходу из одного устойчивого состояния в другое соответствует

излучение одной определенной спектральной линии, частота которой определяется условием частот:

$$[13] \quad \nu = \frac{1}{h} (E' - E'').$$

Принимая во внимание [9] и [7], равенство это можно переписать таким образом

$$[14] \quad \nu = \frac{1}{h} \int \sum \frac{\partial H}{\partial J_i} dJ_i = \frac{1}{h} \int \sum \omega_i dJ_i \cong \sum_1^u (n_i' - n_i'') \omega_i.$$

Но в случае больших квантовых чисел квантовая теория даст результаты, совпадающие с классической, по которой излучаемые частоты типа

$$[15] \quad \nu = \tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2 + \dots + \tau_u \omega_u;$$

чтобы [15] совпало с [14], нужно положить

$$[16] \quad \tau_i = n_i' - n_i'', \quad (i=1, \dots, u)$$

т.е. считать, что целые коэффициенты при ω_i в разложении в ряд Фурье задают величины «квантовых скачков». Гипотетически мы экстраполируем это утверждение на случай любых квантовых чисел.

Считая, что между классической и квантовой теорией существует соответствие, мы утверждаем, что и в случае любых квантовых скачков τ квадраты амплитуд C_τ дают интенсивности спектральных линий. Ввиду того, однако, что механизм излучения по квантовой теории не тот, что по классической, физический смысл величин C_τ иной: для теории квантов величина C_τ^2 определяет *вероятность* перехода с квантовым скачком $\tau = n' - n''$. Равенство нулю C_τ делает соответствующий переход невозможным, и определенная линия из спектра выпадает (правило отбора).

Легко видеть, что квантовая частота излучения ν_{qn} представляет некоторую «среднюю» от классической частоты ν_{kl} , взятую между начальным и конечным состоянием. В самом деле, если положить

$$[17] \quad J_i = n_i' h + \lambda (n_i'' - n_i') h,$$

то при $\lambda = 0$ мы имеем начальное значение импульса J_i' , а при $\lambda = 1$ конечное значение J_i'' , при $0 < \lambda < 1$ — ряд промежуточных значений.

Пользуясь [17], можем записать [14] так:

$$\begin{aligned}
 [18] \quad \nu_{qu} &= \frac{1}{h} \int \sum \frac{\partial H}{\partial J_i} dI_i = \frac{1}{h} \int_0^1 \sum \omega_i h (n_i' - n_i) d\lambda = \\
 &= \int_0^1 \sum \tau_i \omega_i d\lambda = \int_0^1 \nu_{kl} d\lambda,
 \end{aligned}$$

что выражает наше утверждение.

§ 4. В значительном ряде случаев намеченный путь решения задач физики атома привел к результатам, оказавшимся в прекрасном согласии с опытом. Сюда относятся прежде всего задачи о движении электрона в атоме водорода, об эффекте Штарка в атоме водорода, о нормальном эффекте Зеемана и ряд других.

Совершенно не останавливаясь на вычислениях, мы постараемся выяснить те условия, которые являются типичными для «удач» квантовой теории и для ее «неудач».

В задаче о водородном атоме мы имеем движение электрона под действием кулоновских сил притяжения к ядру атома. Если не учитывать релятивистского изменения массы электрона, то в результате вычислений получается для энергии в n -ом устойчивом состоянии известная формула:

$$[19] \quad E = -\frac{Rh}{n^2}, \quad R = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3},$$

откуда получается бальмеровский спектр:

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

Если принять во внимание релятивистское изменение массы электрона при движении его по эллиптической орбите, получаем формулу Зоммерфельда:

$$[20] \quad E = -\frac{Rh}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right],$$

где k — азимутальное квантовое число, определяющее момент количества движения электрона, а α так называемая «постоянная тонкой структуры». В связи с условием частот и принципом соответствия эта формула прекрасно описывает тонкую структуру линий водорода и ионизованного гелия.

В задаче об эффекте Штарка мы имеем дело с движением электрона в поле кулоновских сил при наличии возмущающего действия внешнего постоянного электрического поля. Задача может быть решена, например, по методу возмущений и приводит к совпадающему с опытом значению для энергии.

Если атом водорода поместить в постоянное магнитное поле, то возмущающее действие поля сказывается в прецессии электронной орбиты вокруг направления поля с так называемой ларморовой частотой:

$$[21] \quad \nu = \frac{e}{4\pi mc} H,$$

где H напряженность поля, m масса электрона. Применение метода вековых возмущений дает при этом для энергии

$$[22] \quad E = -\frac{R_h}{n^2} \pm \overline{m} h \nu,$$

где \overline{m} новое квантовое число. Черта над m поставлена, чтобы не смешивать эту величину с массой электрона, входящей в выражение [21].

Правило частот и принципа соответствия дают нормальный эффект Зеемана с расщеплением линий:

$$[23] \quad \Delta\nu = \pm \nu$$

Из этих немногих примеров видно, что описанный выше логический путь теории квантов приводит к результатам, согласным с опытом в тех случаях, когда мы имеем дело с одним электроном под действием центральных сил с постоянными или медленно меняющимися возмущающими силами.

Перейдем теперь к случаям, когда в атоме имеется несколько электронов. Сюда относится прежде всего атом гелия, представляющий собой систему с двумя электронами. Каждый электрон в этой системе движется под действием кулоновского притяжения к ядру, возмущаемого отталкиванием другого электрона. Но это возмущение не может быть описано теми методами, которыми описаны возмущения постоянным электрическим и магнитным полями. Попытки Крамерса, Борна и Гейзенберга произвести расчет спектра гелия по обычному плану привели к выводу, что этот метод принципиально не приложим к этому случаю, когда на рассматриваемый электрон действуют силы, меняющиеся с частотою того же порядка, что и частоты самого рассматриваемого электрона. Эти вычисления не только не дали отчета о структуре спектра гелия, но даже привели к совер-

шенно неправильному значению для его ионизационного потенциала. Можно, следовательно, сказать, что в этом случае на электрон действуют силы такого характера, что их нельзя описать при помощи уравнений обычной механики: возникает представление о «немеханическом действии» (*unmechanischer Zwang*).

В случае, когда в атоме имеется много электронов, но один из них можно «выделить» (например, валентный электрон в щелочных металлах), наш обычный план решения задачи приводит, так сказать, к частичному успеху. В самом деле, в этом случае мы можем представить себе атом в виде некоторого «остова» (*Atomrumpf*), состоящего из ядра и внутренних электронов, в поле которого движется один валентный электрон. *Пренебрегая движениями внутренних электронов*, мы рассматриваем движение валентного электрона в поле, мало отличающемся от кулоновского. Получается для энергии выражение, дающее спектральную формулу Ридберга - Ритца:

$$[24] \quad E = - \frac{R h}{n^{*2}}.$$

Здесь n^* так называемое эффективное квантовое число, не целое, отличающееся от истинного главного квантового числа некоторой дробью q , вообще говоря, неправильной:

$$n^* = n - q.$$

В ряде случаев можно вычислить величину q для каждой отдельной орбиты валентного электрона. На почве этой формулы можно провести систематику спектров сложных элементов с их набором термов s , p , d и т. д., проводя некоторую аналогию между орбитами валентного электрона и рядом эллиптических орбит в атоме водорода.

Однако вычисления подобного рода не могут учесть того важного факта, что в огромном большинстве случаев линии спектральных серий не простые, а сложные: двойники, тройники и т. н. Теоретически учесть расщепление спектральных термов наша схема не дает возможности. Здесь опять требуется нечто новое, какое-то немеханическое действие. В некоторых частных случаях удалось, например, объяснить величину дублета наличием у остова атома внутреннего магнитного поля, вызывающего, так сказать, «внутренний эффект Зеемана». Но последовательное проведение этого взгляда для всех случаев не оказалось возможным.

В тщетных попытках найти какой-нибудь выход теория пошла по пути, весьма странному для теоретической физики. Этот путь

заклучался в построении совершенно формальных схем, основанном на установлении эмпирических закономерностей. Опытные данные мультиплетной структуры спектральных линий тесно связаны с опытными данными магнитных разложений линий в аномальном эффекте Зеемана.

Систематика мультиплетной структуры спектральных линий вместе с систематикой соответствующих магнитных разложений привела к необходимости каждому терму приписывать, кроме главного и азимутального квантовых чисел n и k , еще внутреннее квантовое число j и основное квантовое число r . В магнитном поле к этим квантовым числам присоединяется еще четвертое m — «магнитное». Мы не будем останавливаться на вопросе о нормировке этих квантовых чисел, которая у различных авторов не вполне одинакова. Ланде пользуется, например, значениями этих чисел R, K, J , несколько отличающимися от Зоммерфельдовских.

Физический смысл величин R, K, J тот, что они представляют собою выраженные в единицах $\frac{h}{2\pi}$ моменты количества движения: K — валентного электрона, R — остова, J — всего атома в целом. J есть векторная сумма R и K (см. рис. 1).

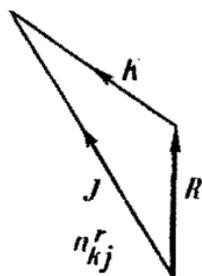
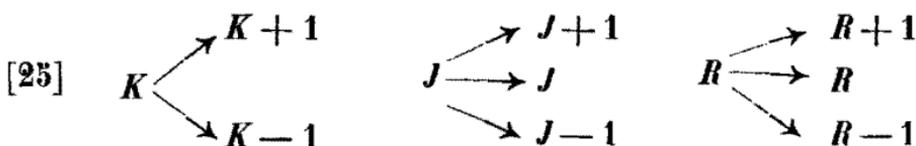


Рис. 1.

Возникновение кратной структуры какого-либо термина ясно из рисунка 2.

Весьма существенным является то обстоятельство, что удовлетворить данным опыта можно, только считая R, K, J не целыми, а «половинными» числами (по крайней мере, в ряде случаев): число K пробегает, например, ряд значений: $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ и т. д. Это совершенно непонятно с точки зрения правил установления дискретных квантовых состояний. Согласно этим правилам, квантовые числа — целые коэффициенты при h в квантовых условиях $J_i = n_i h$. Попытки ввести понятие о «кажущихся» квантовых числах, которые принимают половинные значения вследствие побочных причин, не привели к удовлетворительным результатам.

Принцип соответствия приводит для «скачков» этих квантовых чисел к правилам отбора, изображаемым схемой:



Систематика аномального эффекта Зеемана привела к установлению факта, что энергия атома в магнитном поле изменяется не на величину $m\hbar\omega$, как в нормальном эффекте, а на величину

[26]

$$\Delta E = mgh\omega,$$

где магнитное квантовое число m представляет проекцию полного момента атома (j) на направление магнитного поля, g так называемый «множитель Ланде». Сравнение с формулой для нормального эффекта Зеемана показывает, что в случае аномального эффекта

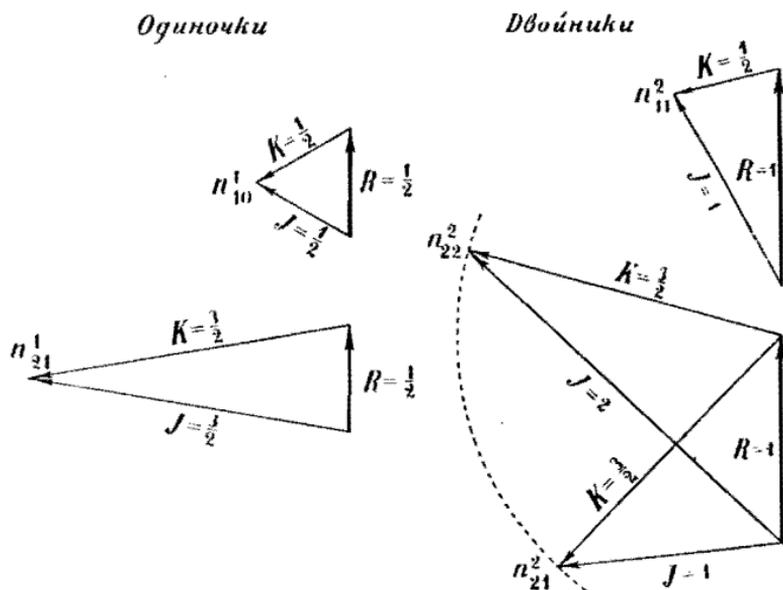


Рис. 2.

можно считать орбиту валентного электрона прецессирующей вокруг направления поля с аномальной частотой прецессии $g\omega$. Отметим здесь же, что по обычным методам теории квантов для системы с любым числом электронов получается обычная ларморова частота ω .

Анализ экспериментального материала показывает, что для всякого термина величина g должна быть определенной функцией квантовых чисел K, J, R . Если пользоваться нормировкой Ланде, то для g получается выражение:

[27]

$$g = 1 + \frac{J^2 - \frac{1}{4} + R^2 - K^2}{\left(J - \frac{1}{4}\right)^2}.$$

Эта формула правильно выражает все экспериментальные факты. Можно было бы понять ее с точки зрения обыкновенных представлений о магнитном взаимодействии остова атома и орбиты валентного электрона, если бы в ней не фигурировала величина $\frac{1}{4}$. Наличие этого члена делает формулу непонятной, даже если принять половинные квантовые числа.

Изучение эффекта Паппепа-Бака, заключающегося в том, что при увеличении поля аномальное разложение переходит постепенно в нормальный эффект, следовательно, g делается равным единице, привело Ланде, Гейзенберга и др. к выводу, что остов атома имеет магнитный момент не нормальный, определяемый его механическим моментом R , а двойной. Это обстоятельство также оказывается необъяснимым с точки зрения обычной теории.

Некоторую возможность объяснить появление того именно значения величины g , которое соответствует опыту, дала одна из работ Гейзенберга. Но в этой работе к основным принципам теории квантов, изложенным выше, присоединяется новый принцип. Таким образом, это объяснение уже не укладывается в рамки обычной «классической» квантовой теории. В виду принципиальной важности этого нового принципа для дальнейшего развития квантовой механики мы скажем об этом несколько слов.

Мы видели выше (формула [18]), что квантовая частота излучения получается путем вычисления некоторого среднего от классической частоты. По аналогии с этой формулой устанавливается следующий принцип: если с классической точки зрения система описывается гамильтоновой функцией $H_{кв}$, то истинный квантовый процесс описывается гамильтоновой функцией $H_{кв}$, составленной по следующему правилу. Сперва находим

$$[28] \quad F = \int H dJ;$$

следовательно,

$$H = \frac{\partial F}{\partial J}.$$

Затем составляем разность

$$\Delta F = F\left(J + \frac{1}{2}\right) - F\left(J - \frac{1}{2}\right)$$

и эту разность полагаем равной квантовой гамильтоновой функции:

$$[29] \quad H_{qu} = \Delta F = \int_{J-\frac{1}{2}}^{J+\frac{1}{2}} H_{kl} dJ.$$

Аналогия этого уравнения с уравнением [18] ясна: квантовая величина получается усреднением классической. Применяя этот принцип ко всем величинам, описывающим атом, мы получаем формальное правило для перехода от классического описания атома к квантовому. Воспользовавшись этим правилом для описания взаимодействия валентного электрона и остова атома, при чем только принимается двойной магнитный момент остова, Гейзенберг получил правильное выражение величины g . Этим же общим принципом воспользовался Крамерс при построении квантовой теории дисперсии.

Мы должны отметить еще одно существенное затруднение теории квантов, которое лежит в несколько иной плоскости.

Формула для релятивистского дублета, которую мы можем записать в виде

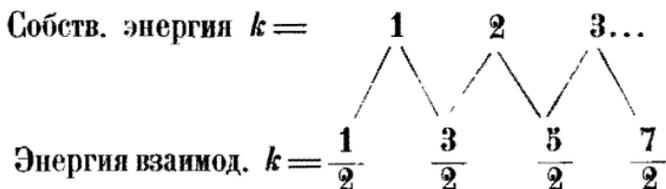
$$[30] \quad \Delta\nu = \frac{R\alpha^2 Z^4}{h^4} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right),$$

где Z атомный номер, прекрасно удовлетворяет закономерностям рентгеновских спектров.

Релятивистская природа дублетов рентгеновских спектров считалась твердо установленной.

Исследования Ланде и в особенности Милликена и Боуена, давших богатый экспериментальный материал, показали, что и дублеты оптических спектров следуют тому же релятивистскому закону, при чем значения термов, как функции Z , могут быть продолжены непрерывным образом из области рентгеновских спектров в область обыкновенных оптических спектров. Но формула [30] показывает, что релятивистский дублет может иметь место между термами, отличающимися азимутальными квантовыми числами k , а в оптике наличие дублетов наблюдается между термами с общим азимутальным числом k и различными внутренними квантовыми числами j . Это обстоятельство представляет для теории значительные трудности, внося путаницу в систематику спектров. Попытку преодолеть эти затруднения сделал Гейзенберг, предположив, что в «немеханическом» взаимодействии электрона с остовом, т.-е. с другими электронами, заклю-

чается особенная двойственность (к мысли о двойственности приводят и другие факты): каждому значению собственной энергии электрона соответствуют два значения энергии взаимодействия валентного электрона с остовом. Это иллюстрируется схемой значений k , пробегающих ряд целых чисел для собственной энергии и ряд «половинных» чисел для энергии взаимодействия:



Эта схема дает возможность до некоторой степени понять указанное противоречие, придавая одному из рядов чисел k значение внутренних квантовых чисел.

Новым ударом для теории квантов явилось открытие, что тонкая структура водородных линий упрощается в сильном магнитном поле так же, как это имеет место в случае магнитного расщепления спектральных линий. Это обстоятельство приводит к предположению, что в данном случае мы, может-быть, имеем вовсе не релятивистский эффект. Для объяснения этого явления оказалось необходимым привлечение понятия о вращающемся электроны.

Мы заканчиваем наш беглый очерк методов «классической» формы теории квантов и тех затруднений, которые она встретила на пути своего развития. Затруднения эти возникают во всех тех случаях, когда имеет место взаимодействие многих электронов. Характер всех этих неудач теории квантов приводит к мысли, что в этих случаях механизм явлений таков, что его невозможно описать при помощи обычных уравнений механики, хотя бы дополненных квантовыми условиями. Являлась даже мысль, что внутриатомные процессы не укладываются в рамки обычных пространственно-временных представлений. Необходимо введение каких-то новых элементов, чуждых обычной механике. Эти новые элементы, новые принципы начали возникать еще совсем недавно, но некоторые из намеченных в этой статье затруднений уже разрешены ими (например, загадка половинных квантовых чисел). Выяснению этих новых путей посвящены остальные статьи настоящего сборника.

ЛИТЕРАТУРА.

1. N. Bohr. Quantentheorie der Linienspektren, 1918.
2. N. Bohr. Die Grundpostulaten der Quantentheorie. ZS. f. Phys. 13. 113. 1923.
3. E. Buchwald. Das Korrespondenzprinzip, 1924.
4. M. Born. Vorlesungen über Atommechanik. 1925.
5. A. Landé und E. Back. Zeemaneffekt und Multiplettstruktur der Spektrallinien, 1925.
6. W. Heisenberg. Über die Abänderung der formalen Regeln der Quantentheorie. ZS. f. Phys. 26, 291. 1924.
7. M. Born. Über Quantenmechanik. ZS. f. Phys. 26. 379. 1924.
8. W. Heisenberg. Zur Quantentheorie der Multiplettstruktur. ZS. f. Phys. 32. 841. 1925.
9. N. Bohr. Atomtheorie und Mechanik. Naturwiss. 14. 1, 1926.
10. A. Landé. Neue Wege der Quantentheorie. Naturwiss. 14. 455. 1926.

ОСНОВЫ НОВОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ГЕЙЗЕНБЕРГА-БОРНА

Г. А. ГРИНБЕРГ

Чрезвычайные и, повидимому, непреодолимые трудности, на которые натолкнулась в своем развитии квантовая теория условно-периодических систем (*), привели к убеждению, что для успешности дальнейшего изучения вопросов атомного строения необходимо какое-то глубоко идущее изменение тех основных положений, на которых это изучение доныне основывалось. Кроме того, то обстоятельство, что эта теория ограничивается рассмотрением вопроса о частотах испускаемых атомом спектральных линий, оставляя совершенно в стороне вопрос об их интенсивности, поляризации и т. д. (**), заставляло стремиться к такому ее изменению и обобщению, при котором оказалось бы возможным подойти также к количественному расчету и этих остававшихся пока совершенно недоступными для теоретического рассмотрения величин.

Попытка указания тех принципов, которые могли бы лечь в основу новой квантовой механики, была сделана в 1925 году Гейзенбергом (Heisenberg) в статье «Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen», появившейся в «Zeitschrift für Physik» (***). Короткое время спустя идеи эти получили значительное развитие и надлежащую математическую обработку в работах Борна (Born), Иордана (Jordan) и самого Гейзенберга (а также Дирака (Dirac) (****)). Позднейшие исследования

(*) Трудности эти подробно рассматриваются в первой статье настоящего сборника.

(**) Принцип соответствия дает количественные указания только в области больших квантовых чисел и малых их изменений.

(***) ZS. f. Phys. 33, 879. 1925.

(****) M. Born und P. Jordan, ZS. f. Phys. 34, 858. 1925. M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, ZS. f. Phys. 35, 557. 1926. P. Dirac, Proc. Roy. Soc. 109, 642. 1925. См. также Born, Probleme der Atomdynamik, Berlin, 1926.

привели к установлению тесного родства между этой теорией и почти одновременно с ней (и независимо от нее) появившейся и получившей с тех пор чрезвычайное развитие теорией Шредингера (Schrödinger), покоящейся, казалось бы, на совсем иных основаниях.

Гейзенберг полагает, что основная причина малой успешности попыток применения классической механики к вопросам атомного строения коренится в том, что она вводит в рассмотрение такие величины, как положение электрона в атоме, частота его обращения по орбите и т. д., тогда как их, по мнению Гейзенберга, должно отнести к принципиально недоступным наблюдению. Величинами же, во всяком случае доступными наблюдению и потому подлежащими изучению, являются частоты, интенсивности и поляризация испускаемых атомом волн, а также его уровни энергии, находящиеся непосредственно по методу электронного удара.

Классическая теория разбивает процесс нахождения электромагнитных волн, испускаемых движущимся в атоме электроном на две части:

1) механическую, заключающуюся в определении координат электрона (в функции времени) из уравнений механики по заданным силам, на него действующим, и

2) электромагнитную, состоящую в вычислении на основании формул электронной теории излучения, исходящего от этого электрона, когда он совершает движение, определяемое уравнениями механической задачи (*).

В противоположность этому теория Гейзенберга ставит себе задачей установление такой системы соотношений непосредственно между амплитудами и частотами испускаемых атомом волн, из которой они (**) могли бы быть определены. Руководящей нитью при установлении такой системы соотношений являются, с одной стороны, комбинационный принцип Ритца, а с другой — стремление по возможности мало уклониться от формы соответственных соотношений классической теории (***)).

(*) Такое разделение задачи, конечно, несколько искусственно, так как в число сил, действующих на электрон, входит и реакция лучеиспускания. Это, однако, для принципиальной постановки вопроса не существенно. К тому же и на практике эти задачи обычно разделяются, если реакция лучеиспускания мала по сравнению с остальными приложенными силами.

(**) А также возможные уровни энергии атома.

(***) Борн в своих лекциях по атомной динамике говорит: «То обстоятельство, что теория условно-периодических движений, основанная на класси-

В качестве вспомогательного математического аппарата новая теория пользуется так называемым исчислением матриц.

Бесконечной квадратной матрицей

$$\left\| \begin{array}{cccc} a(1,1) & a(1,2) & a(1,3) & \dots \\ a(2,1) & a(2,2) & a(2,3) & \dots \\ a(3,1) & a(3,2) & a(3,3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|$$

называется совокупность ∞^2 величин $a(n, m)$ (*), характеризуемых каждая двумя порядковыми числами n и m , определяющими ее положение в указанной таблице. Такую матрицу будем обозначать кратко $(a(n, m))$. Элементы ее $a(n, n)$ с равными значками образуют ее главную диагональ.

Матрицы могут быть рассматриваемы как величины особого рода, правила действий над которыми должны быть установлены специальными соглашениями. Характер этих соглашений, очевидно, вполне произволен и определяется в каждом частном случае особыми соображениями, вытекающими из существа рассматриваемого вопроса.

В дальнейшем будем пользоваться двумя родами матриц, именно матрицами классического движения (которые для краткости будем называть просто «классическими» матрицами) и матрицами квантовыми, которыми пользуется новая квантовая теория. Для обоих родов вводим следующие определения:

1) Матрица равна нулю тогда и только тогда, когда все ее элементы равны нулю.

2) Суммой двух матриц $(a(n, m))$ и $(b(n, m))$ называется такая матрица $(c(n, m))$, каждый элемент которой равен сумме соответствующих элементов исходных матриц, т.-е.

$$c(n, m) = a(n, m) + b(n, m).$$

ческой механике, все же оказалась в состоянии учесть значительное число квантовых явлений, показывает нам, что существенным является не переверт в самой механике, а переход от классической геометрии и кинематики к новому способу представления с помощью элементарных волн» (В о г н, Probleme der Atomdynamik. 1926, стр. 63).

(*) Они называются элементами матрицы.

3) Умножение матрицы $(a(n, m))$ на число A состоит в умножении всех ее элементов на это число, т.-е.

$$(c(n, m)) = A \cdot (a(n, m)),$$

если

$$c(n, m) = A \cdot a(n, m).$$

4) Если все члены матрицы зависят от какого-нибудь параметра t (*), то производной от $(a(n, m))$ по t , т.-е. $\frac{d}{dt} (a(n, m))$ назовем такую матрицу, каждый элемент которой равен производной по t от соответствующего элемента исходной матрицы, т.-е.

$$(b(n, m)) = \frac{d}{dt} (a(n, m)),$$

если

$$b(n, m) = \frac{d}{dt} a(n, m).$$

5) Диагональной матрицей называется такая матрица, все элементы которой, кроме диагональных, равны нулю.

§ 1.

Переходим теперь к изложению математической формулировки новой механики. Ограничимся случаем одной степени свободы и рассмотрим прежде всего периодическое движение электрона. Обычная квантовая теория утверждает, что такой электрон может совершать бесчисленное множество «разрешенных» движений, характеризуемых квантовыми числами $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$. При этом, когда электрон совершает движение по n -й квантовой орбите с частотой ν_n , то координата его $q(n)$ может быть представлена в виде такого ряда Фурье:

$$[1] \quad q(n) = \sum_{k=0}^{k=\infty} A_k(n) \cos(2\pi\nu_n kt + x_k)$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

или, что то же,

$$[1'] \quad q(n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} q_{\tau}(n) \cdot e^{2\pi i \nu_n \tau t},$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

(*) Т.-е. если $a(n, m) = a(n, m, t)$.

при чем $q_{\tau}(n)$ и $q_{-\tau}(n)$ — сопряженные комплексные величины, связанные с $A_{\tau}(n)$ соотношениями:

$$[2] \quad \begin{cases} q_{\tau}(n) = \frac{1}{2} A_{\tau}(n) \cdot e^{i\alpha_{\tau}}, \\ q_{-\tau}(n) = \frac{1}{2} A_{\tau}(n) e^{-i\alpha_{\tau}}, \end{cases} \quad A_{\tau}^2(n) = 4q_{\tau}(n)q_{-\tau}(n).$$

Формулы [1] и [1'] дают то, что мы назовем механическим спектром движения.

Электромагнитное излучение, испускаемое таким электроном, должно было бы, по классической теории, состоять из ряда равноотстоящих линий, частоты которых совпадают с частотами механического спектра, а интенсивности пропорциональны квадратам соответственных амплитуд $A_{\tau}(n)$ механического спектра. Каждое такое монохроматическое излучение можно характеризовать членом вида $I_{\tau}(n) \cdot \cos(2\pi\nu_n \tau t - \beta_{\tau})$ или, что то же, двумя членами вида $S_{\tau}(n)e^{2\pi i\nu_n \tau t}$ и $S_{-\tau}(n)e^{-2\pi i\nu_n \tau t}$, где $S_{\tau}(n)$ и $S_{-\tau}(n)$ — сопряженные комплексные величины.

Введем, для краткости, обозначение $\omega_n = 2\pi\nu_n$. Тогда мы можем все члены рядов [1'], соответствующих всем возможным квантовым движениям (при $n = 1, 2, 3, \dots$), объединить в такой квадратной схеме:

$$[3] \quad \begin{vmatrix} q_0(1) & q_{-1}(1)e^{-i\omega_1 t} & q_{-2}(1)e^{-i2\omega_1 t} & q_{-3}(1)e^{-i3\omega_1 t} & \dots \\ q_1(1)e^{i\omega_1 t} & q_0(2) & q_{-1}(2)e^{-i\omega_2 t} & q_{-2}(2)e^{-i2\omega_2 t} & \dots \\ q_2(1)e^{i2\omega_1 t} & q_1(2)e^{i\omega_2 t} & q_0(3) & q_{-1}(3)e^{-i\omega_3 t} & \dots \\ q_3(1)e^{i3\omega_1 t} & q_2(2)e^{i2\omega_2 t} & q_1(3)e^{i\omega_3 t} & q_0(4) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix};$$

n -ому квантовому движению соответствуют в этой таблице элементы, расположенные вправо по строке и вниз по столбцу от элемента $q_0(n)$ главной диагонали. Рассматривая эту схему как совокупность ∞^2 величин $q_{\tau}(n)e^{i\omega_n \tau t}$, назовем ее матрицей классического движения или, проще, «классической» матрицей \bar{q}

$$\bar{q} = (q_{\tau}(n)e^{i\omega_n \tau t}).$$

В полном соответствии с этим всю совокупность ожидаемых по классической электродинамике спектральных проявлений атома можно выразить совершенно аналогичной матрицей, при чем только все $q_{\tau}(n)$ заменяется через $S_{\tau}(n)$ — комплексные амплитуды излучения соответствующей частоты.

Для определения величины $q_\tau(n)$ и ω_n служат, прежде всего, дифференциальные уравнения движения (*) (отдельно для $n=1, 2, 3, \dots, \infty$), каждое из которых даст систему из бесконечного числа уравнений, получаемых приравнением нулю коэффициентов при всех степенях $e^{i\omega_n \tau}$ — всего ∞^2 уравнений. Если, например, уравнение движения имеет вид

$$[4] \quad \ddot{q}(n) + x^2 q(n) = 0, \quad (x^2 = \text{Const.}) \quad (1 \leq n \leq \infty)$$

то, подставляя вместо $q(n)$ его значение из уравнения [1'], найдем:

$$\sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} [- (\omega_n \tau)^2 q_\tau(n) + x^2 q_\tau(n)] e^{i\omega_n \tau t} = 0,$$

т.-е.

$$[5] \quad [- (\omega_n \tau)^2 + x^2] q_\tau(n) = 0. \quad \left\{ \begin{array}{l} (1 \leq n \leq \infty) \\ (-\infty \leq \tau \leq +\infty) \end{array} \right.$$

Всю эту систему можно соединить в одно символическое уравнение, если ввести в рассмотрение вышеуказанную матрицу \bar{q} . Легко видеть, что всей системе уравнений [5] соответствует одно—матричное:

$$[6] \quad \ddot{\bar{q}} + x^2 \bar{q} = 0.$$

Действительно, пользуясь определениями 2), 3) и 4) (см. введение), найдем:

$$\begin{aligned} \ddot{\bar{q}} + x^2 \bar{q} &= \frac{d^2}{dt^2} (q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t}) + x^2 (q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t}) = \left(\frac{d^2}{dt^2} [q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t}] + \right. \\ &\quad \left. + x^2 q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t} \right) = \left([- (\omega_n \tau)^2 + x^2] q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t} \right) = 0, \end{aligned}$$

а так как, при равенстве матрицы нулю, каждый ее член должен быть равен нулю, то это дает:

$$[- (\omega_n \tau)^2 + x^2] q_\tau(n) e^{i\omega_n \tau t} = 0, \quad \text{при} \quad \left\{ \begin{array}{l} (1 \leq n \leq \infty), \\ (-\infty \leq \tau \leq +\infty), \end{array} \right.$$

т.-е. как раз получается система [5].

Если бы исходные уравнения движения содержали, кроме $q(n)$, еще $q^2(n)$, $q^3(n)$ и т. д., напр., имели бы вид

$$[7] \quad \ddot{q}(n) + x^2 q(n) + \alpha q^2(n) + \beta q^3(n) + \dots = 0,$$

(α и β — постоянные),

то для приведения получающейся отсюда системы к матричному виду пришлось бы к данным выше определениям действий добавить

(*) И, кроме того, квантовые условия.

еще правило умножения таких «классических» матриц, выбравши его подходящим образом. Как именно следует его выбрать, ясно из следующего: так как $q(n)$ представляется рядом Фурье, т.-е.

$$q(n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} q_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t},$$

то и $[q(n)]^m$ представится в аналогичной форме:

$$[8] \quad [q(n)]^m = \left[\sum_{\tau} q_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t} \right]^m = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} q_{\tau}^{(m)}(n) e^{i\omega_n \tau t}, \quad (1 \leq n \leq \infty),$$

при чем $q_{\tau}^{(m)}(n)$ выражается через коэффициенты $q_{\tau}(n)$. Поэтому [7] дает:

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} \left\{ [-(\omega_n \tau)^2 + x^2] q_{\tau}(n) + \alpha q_{\tau}^{(2)}(n) + \beta q_{\tau}^{(3)}(n) + \dots \right\} e^{i\omega_n \tau t} = 0,$$

т.-е.

$$[9] \quad [-(\omega_n \tau)^2 + x^2] q_{\tau}(n) + \alpha q_{\tau}^{(2)}(n) + \beta q_{\tau}^{(3)}(n) + \dots = 0, \\ (1 \leq n \leq \infty), \\ (-\infty \leq \tau \leq +\infty).$$

Все эти уравнения можно, также как и раньше, соединить в одно, если ввести в рассмотрение матрицы, составленные из членов рядов [8], т.-е.

$$[10] \quad \bar{q}^m = \begin{vmatrix} q_0^{(m)}(1) & q_{-1}^{(m)}(1) e^{-i\omega_1 t} & q_{-2}^{(m)}(1) e^{-i \cdot 2\omega_1 t} & q_{-3}^{(m)}(1) e^{-i3\omega_1 t} & \dots \\ q_1^{(m)}(1) e^{i\omega_1 t} & q_0^{(m)}(2) & q_{-1}^{(m)}(2) e^{-i\omega_2 t} & q_{-2}^{(m)}(2) e^{-i2\omega_2 t} & \dots \\ q_2^{(m)}(1) e^{i2\omega_1 t} & q_1^{(m)}(2) e^{i\omega_2 t} & q_0^{(m)}(3) & q_{-1}^{(m)}(3) e^{-i\omega_3 t} & \dots \\ q_3^{(m)}(1) e^{i3\omega_1 t} & q_2^{(m)}(2) e^{i2\omega_2 t} & q_1^{(m)}(3) e^{i\omega_3 t} & q_0^{(m)}(4) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Тогда уравнения [9] соединяются в одно такое

$$[11] \quad \bar{q} + x^2 \bar{q} + \alpha \bar{q}^2 + \beta \bar{q}^3 + \dots = 0.$$

Сюда входят различные матрицы \bar{q} , \bar{q}^2 , \bar{q}^3 и т. д. Формулируем теперь правило умножения матрицы на матрицу таким образом, чтобы все они выразились через одну, именно через \bar{q} . Пусть

$$\bar{u} = (u_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t}) \quad \text{и} \quad \bar{v} = (v_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t})$$

это две матрицы, составленные из членов рядов

$$u(n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} u_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t} \quad \text{и} \quad v(n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} v_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t}. \quad (1 \leq n \leq \infty).$$

Потребуем, чтобы матрица \overline{uv} , составленная из членов рядов, получаемых при перемножении $u(n)$ и $v(n)$, т.-е.

$$\begin{aligned} [12] \quad u(n) \cdot v(n) &= \left(\sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} u_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t} \right) \cdot \left(\sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} v_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t} \right) = \\ &= \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=+\infty} \left(\sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} u_{\tau-m}(n) v_m(n) \right) e^{i\omega_n \tau t}, \end{aligned}$$

равнялась бы произведению $\overline{u} \cdot \overline{v}$ исходных матриц друг на друга:

$$[13] \quad \overline{u} \cdot \overline{v} = \overline{u \cdot v}$$

Этим требованием правило умножения определяется однозначно, ибо если \overline{u} равны матрицы, то равны все их элементы, а элементы матрицы $u \cdot v$ даются формулой [12]. Получается:

$$[14] \quad \overline{p} = \overline{u} \cdot \overline{v} = \overline{uv} = \left(\left[\sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} u_{\tau-m}(n) \cdot v_m(n) \right] \cdot e^{i\omega_n \tau t} \right) = (p_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t}),$$

т.-е. элемент $p_{\tau}(n) e^{i\omega_n \tau t}$ произведения двух матриц равен сумме попарных произведений всех тех членов исходных матриц, сумма показателей степеней которых равна показателю степени получаемого члена произведения.

Полагая в формуле [13] $\overline{u} = \overline{v} = \overline{q}$, получим теперь:

$$[15] \quad \overline{q} \cdot \overline{q} = \overline{q^2} = \overline{q^2}.$$

и, очевидно, вообще:

$$[15'] \quad \overline{q^m} = \overline{q^m},$$

где слева стоит степень матрицы, а справа — матрица от степени. Уравнение [9] принимает теперь такой вид:

$$[16] \quad \overline{q} + \alpha^2 \overline{q} + \alpha \overline{q^2} + \beta \overline{q^3} + \dots = 0.$$

Это уравнение содержит уже только одну матрицу \overline{q} и может, поэтому, служить (совместно с квантовыми условиями) для определения амплитуд $q_{\tau}(n)$ и частот $\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi}$ отдельных гармонических ко-

лебаний, на которые распадается движение электрона, а, стало быть, и для нахождения пропорциональных им амплитуд монохроматических волн, обладающих теми же частотами ν_n и составляющих, по классической теории, оптический спектр атома.

Однако, на самом деле частоты $\nu(n, m)$ испускаемых атомом волн носят совсем иной характер, именно они представляются в виде разностей ряда спектральных термов $T_1, T_2, T_3, \dots T_\infty$, т.-е.

$$[17] \quad \nu(n, m) = T_n - T_m$$

(комбинационный принцип). В связи с этим основное допущение новой квантовой теории состоит в том, что и координату q должно характеризовать не классической матрицей \bar{q} , представляющей всю совокупность возможных гармонических колебаний, а квантовой матрицей \underline{q}

$$[18] \quad \bar{q} = \begin{vmatrix} q(1,1)e^{2\pi i\nu(1,1)t} & q(1,2)e^{2\pi i\nu(1,2)t} & q(1,3)e^{2\pi i\nu(1,3)t} & \dots \\ q(2,1)e^{2\pi i\nu(2,1)t} & q(2,2)e^{2\pi i\nu(2,2)t} & q(2,3)e^{2\pi i\nu(2,3)t} & \dots \\ q(3,1)e^{2\pi i\nu(3,1)t} & q(3,2)e^{2\pi i\nu(3,2)t} & q(3,3)e^{2\pi i\nu(3,3)t} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \\ = (q(n, m)e^{2\pi i\nu(nm)t}),$$

отдельные члены которой соответствуют колебаниям со спектральными частотами $\nu(n, m)$. Т. к. $\nu(n, m) = 0$ (см. [17]), то диагональные элементы ее от времени не зависят. В этой схеме амплитуды $q(n, m)$ и $q(m, n)$ — это комплексные сопряженные величины (*), также как соответствующие (***) члены матрицы \bar{q} .

Величины $q(n, m)$ уже не стоят в таком прямом отношении к внутриатомным движениям, как $q_c(n)$. Квадрат абсолютной величины $q(n, m)$, или, что то же самое, произведение

$$q(n, m) \cdot q(m, n) = |q(n, m)|^2,$$

должно, однако, также как в классической теории, определять собой интенсивность линии $\nu(n, m)$ спектра (***) .

Новая квантовая теория постулирует: матричная форма уравнений классической механики должна быть перенесена без изменений в механику квантовую, при чем, однако, место классической матрицы \bar{q} должна заступить квантовая — \underline{q} . При этом, чтобы все

(*) Матрицы, удовлетворяющие этому условию, называются эрмитовскими.
 (**) Т.-е. стоящие на пересечении тех же столбца и строки.
 (***) В том случае, если q — это декартова координата.

матрицы \bar{q}^m принадлежали к тому же типу, как и \bar{q} (*), устанавливается следующее правило умножения: произведением матриц $\bar{a} = (a(n, m)e^{2\pi i\nu(n, m)t})$ и $\bar{b} = (b(n, m)e^{2\pi i\nu(n, m)t})$ называется такая матрица \bar{c}

$$19 \quad \bar{c} = (c(n, m)e^{2\pi i\nu(n, m)t}) = \bar{a} \cdot \bar{b},$$

в которой $c(n, m)$ определяется по формуле

$$[20] \quad c(n, m) = \sum_{k=1}^{k=\infty} a(n, k) \cdot b(k, m).$$

Это правило совершенно аналогично данному выше для умножения «классических» матриц, так как $c(n, m)e^{2\pi i\nu(n, m)t}$ представляет собой не что иное, как сумму попарных произведений тех членов перемножаемых матриц, сумма показателей степеней которых равна показателю степени получаемого элемента произведения. Действительно,

$$a(n, k)e^{2\pi i\nu(n, k)t} \cdot b(k, m) \cdot e^{2\pi i\nu(k, m)t} = a(n, k) \cdot b(k, m)e^{2\pi i\nu(n, m)t},$$

так как комбинационный принцип дает (см. [17]):

$$\nu(n, k) + \nu(k, m) = \nu(n, m),$$

и, стало быть, $c(n, m) \cdot e^{2\pi i\nu(n, m)t}$ — это сумма таких попарных произведений, соответствующих всем возможным значениям $k \geq 1$. Заметим, что $\bar{a}\bar{b} \neq \bar{a}\bar{b}$, т.-е. произведение матриц не коммутативно.

С помощью правила умножения, можем теперь определить функцию $\bar{f}(\bar{q})$ от матрицы. Именно, если

$$f(x) = \sum_p a_p x^p,$$

то полагаем

$$f(\bar{q}) = \sum_p a_p \bar{q}^p$$

(*) Т.-е. чтобы ее элементы имели вид

$$q^{(m)}(n, p)e^{2\pi i\nu(n, p)t} \quad \left(\begin{array}{l} 1 \leq n \leq \infty \\ 1 \leq p \leq \infty \end{array} \right)$$

где n — это номер той строки, а p — того столбца, на пересечении которых указанный элемент стоит.

Аналогично определим функцию от двух матриц \bar{q} и \bar{p} (конечно, однотинных, т.-е. с одинаковыми частотами на соответственных местах):

$$\bar{f}(\bar{q}, \bar{p}) = \sum_m \alpha_m \prod_{j=1}^{j=k} p^{s_j(m)} q^{-r_j(m)}.$$

Функций, не выражающихся степенными рядами, матричная теория не рассматривает.

Согласно основному допущению, положенному в основу новой механики, имеем, стало быть, вместо уравнения [16] такое:

$$[21] \quad \ddot{\bar{q}} + \alpha^2 \bar{q} + \bar{\alpha} \bar{q}^2 + \beta \bar{q}^3 + \dots = 0.$$

Оно совершенно тождественно по форме с классическим уравнением движения [7] с той только разницей, что место координаты q занимает теперь характеризующая ее матрица \bar{q} .

Борн нищет уравнения новой механики в гамильтоновой форме, для чего он на ряду с координатной матрицей \bar{q} вводит еще матрицу импульса $\bar{p} = (p(n, m)e^{2\pi i \nu(n, m) t})$ и составляет гамильтонову функцию $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ (*). Далее формулируется правило дифференцирования матрицы по матрице:

$$[22] \quad \frac{d\bar{f}(\bar{x})}{d\bar{x}} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\bar{f}(\bar{x} + \alpha \cdot \bar{1}) - \bar{f}(\bar{x})}{\alpha},$$

при чем $\bar{1}$ — это так называемая единичная матрица.

$$[23] \quad \bar{1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = (\delta_{mn}),$$

где $\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n \\ 0 & \text{при } m \neq n \end{cases}$, а α — число, стремящееся к нулю.

Например:

$$\frac{d\bar{x}}{d\bar{x}}(m, n) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \left\{ [x(m, n) + \alpha \cdot \delta_{mn}] - x(m, n) \right\} = \delta_{mn},$$

т.-е.

$$[24] \quad \frac{d\bar{x}}{d\bar{x}} = \bar{1}.$$

(*) В дальнейшем будем множитель $e^{2\pi i \nu(n, m) t}$ в выражении (n, m) -го члена матрицы подразумевать, не вынося его явно. Напр., будем писать $\bar{p} = [p(n, m)]$, $\bar{q} = [q(n, m)]$ и т. д.

Так же легко докажем правило

$$[25] \quad \frac{d\bar{\varphi}\bar{\psi}}{dx} = \bar{\varphi} \frac{d\bar{\psi}}{dx} + \frac{d\bar{\varphi}}{dx} \bar{\psi},$$

где $\bar{\varphi}(x)$ и $\bar{\psi}(x)$ какие угодно функции матрицы x . Действительно:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\varphi}\bar{\psi}}{dx} &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} [\bar{\varphi}(x + \alpha \cdot \bar{1})\bar{\psi}(x + \alpha \cdot \bar{1}) - \bar{\varphi}(x) \cdot \bar{\psi}(x)] = \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \left\{ \bar{\varphi}(x + \alpha \cdot \bar{1}) \cdot \left[\frac{\bar{\psi}(x + \alpha \cdot \bar{1}) - \bar{\psi}(x)}{\alpha} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\bar{\varphi}(x + \alpha \cdot \bar{1}) - \bar{\varphi}(x)}{\alpha} \right] \cdot \bar{\psi}(x) \right\}^{(*)} = \bar{\varphi} \frac{d\bar{\psi}}{dx} + \frac{d\bar{\varphi}}{dx} \bar{\psi}. \end{aligned}$$

[24] и [25] дают важную формулу:

$$[26] \quad \frac{dx^{-n}}{dx} = nx^{-n-1}.$$

Если дифференцируемая матрица зависит от нескольких матриц — x_1, x_2, \dots, x_n , то частная производная от нее по x_i находится по тому же правилу, при чем все прочие x_j считаются постоянными.

С помощью этого обозначения уравнения Гамильтона напишутся теперь так:

$$[27] \quad \begin{cases} \dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}}, \\ \dot{\bar{p}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}}, \end{cases} \quad \bar{H} = \bar{H}(\bar{p}, \bar{q}).$$

Если

$$\text{то} \quad \bar{H} = \frac{1}{2m} \bar{p}^2 + m \left(\frac{x^2}{2} \bar{q}^2 + \frac{\alpha}{3} \bar{q}^3 + \frac{\beta}{4} \bar{q}^4 + \dots \right),$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{m} \bar{p} = \dot{\bar{q}}, \quad \dot{\bar{p}} = m \ddot{\bar{q}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} = -m(x^2 \bar{q} + \alpha \bar{q}^2 + \beta \bar{q}^3 + \dots)$$

т.-е.

$$\ddot{\bar{q}} + x^2 \bar{q} + \alpha \bar{q}^2 + \beta \bar{q}^3 + \dots = 0,$$

так что, как и следует, получается вновь уравнение [21].

(*) Ибо распределительный закон

$$\bar{a}(\bar{b} + \bar{c}) = \bar{a}\bar{b} + \bar{a}\bar{c},$$

как явствует из определений основных действий, имеет место. Очевидно, также, что

$$\bar{a} + \bar{b} = \bar{b} + \bar{a}.$$

§ 2.

Подобно тому, как из всей совокупности решений гамильтоновых уравнений обычной механики, соответствующих определенной гамильтоновой функции $H(p, q)$, выбираем с помощью дополнительных ограничений — квантовых условий — некоторые определенные, так и к уравнениям [27] надо для определенности решения присоединить некое дополнительное условие. Таким ограничивающим условием является «переместительное правило» (Verlauschungsregel) Борна, которое формулируется им так:

$$[28] \quad \overline{p q} - \overline{q p} = \frac{h}{2\pi i} \overline{1},$$

где h — постоянная Планка, $i = \sqrt{-1}$. Каждый член этой диагональной матрицы «соответствует» одному из квантовых условий

$$[29] \quad \oint p(n) dq(n) = \int_0^{\frac{1}{\nu_n}} p(n) \dot{q}(n) dt = nh, \quad (n = 1, 2, 3, \dots, \infty)$$

классической механики.

Чтобы показать, что это действительно так, преобразуем сперва формулу [29]. Так как

$$p(n) = \sum_{\tau = -\infty}^{+\infty} p_{\tau}(n) e^{2\pi i \nu_n \tau t},$$

$$\dot{q}(n) = \sum_{\tau = -\infty}^{+\infty} 2\pi i \nu_n \tau q_{\tau}(n) e^{2\pi i \nu_n \tau t},$$

то, перемножая эти ряды, подставляя результат в левую часть уравнения [29] и принимая во внимание, что

$$\int_0^{\frac{1}{\nu_n}} e^{2\pi i \nu_n \tau t} dt = \begin{cases} \frac{1}{\nu_n} & \text{при } \tau = 0 \\ 0 & \text{при } \tau \neq 0, \end{cases}$$

получим:

$$[30] \quad 2\pi i \sum_{\tau = -\infty}^{+\infty} \tau q_{\tau}(n) p_{-\tau}(n) = nh.$$

Берем производную по n :

$$[31] \quad \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \tau \frac{\partial}{\partial n} [q_{\tau}(n) p_{-\tau}(n)] = \frac{h}{2\pi i}.$$

С этим выражением будем сравнивать (n, n) -й элемент матрицы

$$\bar{a} = \bar{p} \bar{q} - \bar{q} \bar{p} = \frac{h}{2\pi i} \bar{1}. \text{ Он равен (см. правило умножения)}$$

$$[32] \quad a(n, n) = \sum_{k=1}^{k=\infty} [p(n, k) q(k, n) - q(n, k) p(k, n)] = \frac{h}{2\pi i}.$$

Эту сумму можем представить еще в другой форме. Именно,

полагая в сумме $S_1 = \sum_{k=1}^{\infty} p(n, k) q(k, n) \rightarrow k = n + \tau, k = 1 \rightarrow \tau = -n + 1, k = \infty \rightarrow \tau = \infty$, получим

$$S_1 = \sum_{\tau=-n+1}^{+\infty} p(n, n + \tau) q(n + \tau, n).$$

Аналогично:

$$S_2 = \sum_{k=1}^{k=\infty} q(n, k) p(k, n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=n-1} q(n, n - \tau) p(n - \tau, n),$$

и формула [32] переищется так:

$$[33] \quad a(n, n) = \sum_{\tau=-n+1}^{\tau=n-1} [p(n, n + \tau) q(n + \tau, n) - q(n, n - \tau) p(n - \tau, n)] +$$

$$+ \left\{ \sum_{\tau=n}^{\tau=\infty} p(n, n + \tau) q(n + \tau, n) - \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=-n} q(n, n - \tau) p(n - \tau, n) \right\}^{(*)} = \frac{h}{2\pi i}.$$

(*) Предполагаем, что порядок членов в этой сумме указанным образом менять можно.

Квантовым величинам, входящим в первую из этих сумм, «соответствуют» следующие классические, занимающие соответственные места в матрицах \bar{q} и \bar{p} (см. таблицу [3]):

$$\begin{aligned} q(n + \tau, n) &\rightarrow q_{\tau}(n), \\ q(n, n - \tau) &\rightarrow q_{\tau}(n - \tau), \\ p(n, n + \tau) &\rightarrow p_{-\tau}(n), \\ p(n - \tau, n) &\rightarrow p_{-\tau}(n - \tau), \end{aligned}$$

с помощью чего устанавливаем соответственные сумм:

$$\begin{aligned} &\sum_{\tau = -(n-1)}^{+(n-1)} \left[p(n, n + \tau) q(n + \tau, n) - q(n, n - \tau) p(n - \tau, n) \right] \rightarrow \\ &\rightarrow \sum_{\tau = -(n-1)}^{+(n-1)} \left[p_{-\tau}(n) q_{\tau}(n) - q_{\tau}(n - \tau) p_{-\tau}(n - \tau) \right] = 1. \end{aligned}$$

Так как $q_{\tau}(m)p_{-\tau}(m) = f(m)$ — это некоторая функция от m , которая в области больших m меняется очень медленно (*), то можно разность двух ее близких значений при $m = n$ и $m = n - \tau$ (при $\tau \ll n$) выразить через производную в точке $m = n$:

$$\frac{f(n) - f(n - \tau)}{\tau} \cong \frac{df(n)}{dn},$$

т. е.

$$q_{\tau}(n)p_{-\tau}(n) - q_{\tau}(n - \tau)p_{-\tau}(n - \tau) \cong \tau \frac{d}{dn} \left[q_{\tau}(n)p_{-\tau}(n) \right],$$

так что в пределе при $n \rightarrow \infty$ формула [33] даст (если еще принять во внимание, что при $n \rightarrow \infty$ дополнительные суммы в правой ее части стремятся к нулю):

$$\sum_{\tau = -\infty}^{+\infty} \tau \frac{d}{dn} \left[q_{\tau}(n)p_{-\tau}(n) \right] = \frac{h}{2\pi i},$$

т. е. получается формула [31], чем и доказывается соответствие условий [31] и [32].

Что же касается остальных элементов матрицы $\bar{a} = \bar{p} \bar{q} - \bar{q} \bar{p}$, то они должны соответствовать членам вида $B_{\tau} e^{2\pi i \nu n \tau}$ в левой части равенства [31]. Так как там, однако, таких членов нет (они обратились в нуль при интегрировании по времени за период), то естественно положить $a(n, m) = 0$ при $n \neq m$, что и приводит к условию [28].

(*) Область больших квантовых чисел.

Уравнения [27] и условие, что при $n \neq m \rightarrow a(n, m) = 0$, однако, друг от друга не независимы, а потому желательно проверить их совместность. В том весьма важном частном случае когда гамильтонова функция $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ складается из двух частей, из которых одна зависит только от q , другая только от p , т. е.

$$[34] \quad \bar{H}(\bar{p}, \bar{q}) = \bar{H}_1(\bar{p}) + \bar{H}_2(\bar{q}),$$

где $\bar{H}_1(\bar{p}) = \sum_s \alpha_s \bar{p}^s$ и $\bar{H}_2 = \sum_k \beta_k \bar{q}^k$, — можно второе весьма легко вывести из первых.

Действительно, составим производную от $\bar{a} = \bar{p}\bar{q} - \bar{q}\bar{p}$ по времени:

$$\frac{d\bar{a}}{dt} = \dot{\bar{p}}\bar{q} + \bar{p}\dot{\bar{q}} - \dot{\bar{q}}\bar{p} - \bar{q}\dot{\bar{p}}.$$

Заменяя здесь $\dot{\bar{p}}$ и $\dot{\bar{q}}$ их значениями из уравнений [27], найдем:

$$[35] \quad \frac{d\bar{a}}{dt} = \left(\bar{q} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} \bar{q} \right) + \left(\bar{p} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} \bar{p} \right),$$

но

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} = \frac{\partial \bar{H}_1}{\partial \bar{p}} = \sum_s \alpha_s s \bar{p}^{s-1}, \quad \bar{p} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} \bar{p} = 0.$$

Аналогично получается:

$$\bar{q} \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} - \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} \bar{q} = 0,$$

и [35] дает:

$$\frac{d\bar{a}}{dt} = 0,$$

т. е. $\bar{a} = \bar{p}\bar{q} - \bar{q}\bar{p}$ — это действительно диагональная матрица.

В общем случае какой угодно гамильтоновой функции $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ можно показать, что при выполнении условия (28) не только левая, но и правая часть уравнения (35) обращается в нуль тождественно.

§ 3.

Покажем теперь, что из уравнений [27] и [28] вытекают постоянство полной энергии системы и правило частоты Бора. С этой целью докажем, прежде всего, справедливость равенств

$$[36] \quad \begin{cases} \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial \bar{p}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{\varphi} \bar{q} - \bar{q} \bar{\varphi}), \\ -\frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial \bar{q}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{\varphi} \bar{p} - \bar{p} \bar{\varphi}), \end{cases}$$

где $\bar{\varphi} = \bar{\varphi}(\bar{p}, \bar{q})$ — это какая угодно функция от \bar{p} и \bar{q} .

Если $\bar{\varphi}_1 = \bar{u}$ и $\bar{\varphi}_2 = \bar{v}$ — это две матрицы, удовлетворяющие условиям [36], то сумма их $\bar{\varphi}_3 = \bar{u} + \bar{v}$, очевидно, тоже будет им удовлетворять. Легко показать, что и для произведения их $\bar{\varphi} = \bar{u} \cdot \bar{v}$ теорема также остается справедливой.

Действительно:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi} \dot{q} - \dot{q} \bar{\varphi} &= \bar{u} \cdot \dot{v} \cdot \bar{q} - \dot{q} \bar{u} \bar{v} = \bar{u} (\bar{v} \dot{q} - \dot{q} \bar{v}) + (\bar{u} \dot{q} - \dot{q} \bar{u}) \bar{v} = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \left[\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{p}} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{p}} \bar{v} \right] = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial (\bar{u} \bar{v})}{\partial \bar{p}} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \bar{z}}{\partial \bar{p}}. \end{aligned}$$

Так же получим:

$$-\frac{2\pi i}{h} \frac{\partial (\bar{u} \bar{v})}{\partial \bar{q}} = \bar{u} \bar{v} \cdot \bar{p} - \bar{p} \cdot \bar{u} \bar{v},$$

и теорема доказана. Так как для $\bar{u} = \bar{p}$ и $\bar{v} = \bar{q}$ уравнения [36] выполняются в силу переместительного правила [28], и так как любая функция $\bar{\varphi}(\bar{p}, \bar{q})$ получается из \bar{p} и \bar{q} рядом сложений и умножений, то формулы [36] доказаны для всякой $\bar{\varphi}(\bar{p}, \bar{q})$. В частности, для $\bar{\varphi} = \bar{H}$ они дают:

$$[37] \quad \begin{cases} \dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{H} \bar{q} - \bar{q} \bar{H}), \\ \dot{\bar{p}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{H} \bar{p} - \bar{p} \bar{H}). \end{cases}$$

Основываясь на этих формулах, можем теперь показать, что для любой функции $\bar{\varphi}(\bar{p}, \bar{q})$ имеет место соотношение:

$$[38] \quad \dot{\bar{\varphi}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{H} \bar{\varphi} - \bar{\varphi} \bar{H}).$$

Допустим опять, что функции \bar{u} и \bar{v} этому соотношению удовлетворяют. Тогда сумма их ему, очевидно, тоже удовлетворяет. Для произведения их находим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\bar{u} \bar{v}) &= \dot{\bar{u}} \bar{v} + \bar{u} \dot{\bar{v}} = \frac{2\pi i}{h} \left[(\bar{H} \bar{u} - \bar{u} \bar{H}) \bar{v} + \bar{u} (\bar{H} \bar{v} - \bar{v} \bar{H}) \right] = \\ &= \frac{2\pi i}{h} \left[\bar{H} (\bar{u} \bar{v}) - (\bar{u} \bar{v}) \bar{H} \right], \end{aligned}$$

а отсюда, как и при доказательстве формул [36] заключаем, что раз условие [38] выполняется для $\bar{u} = \bar{q}$ и $\bar{v} = \bar{p}$ (формулы [37]), то оно

справедливо для какой угодно функции $\bar{\varphi}(\bar{p}, \bar{q})$. Полагая $\bar{\varphi} = \bar{H}$, найдем поэтому:

$$[39] \quad \dot{\bar{H}} = \frac{2\pi i}{h} (\bar{H} \bar{H} - \bar{H} \bar{H}) = 0, \quad H(n, m) = \begin{cases} H_n & \text{при } m = n \\ 0 & \text{при } m \neq n, \end{cases}$$

и закон энергии доказан.

Чтобы получить правило частоты Бора, обратимся к первому уравнению [37], из которого получаем, переходя к элементам матриц:

$$2\pi i \nu(n, m) q(n, m) = \frac{2\pi i}{h} q(n, m) [H(n, n) - H(m, m)] (*),$$

т.-е.

$$[40] \quad \nu(n, m) = \frac{H_n - H_m}{h},$$

и тем самым показано, что и закон энергии, и правило Бора получаются из уравнений [27] и [28] без каких бы то ни было добавочных предположений.

В своем изложении новой квантовой механики мы, с целью лучшего выяснения ее физических основ, сначала постулировали, исходя из соображений соответствия, справедливость уравнений Гамильтона и «переместительного правила» [28], а затем уже, пользуясь ими, доказали закон энергии и правило частоты Бора. В настоящее время предпочитают, однако, идти до известной степени обратным путем. Именно, не обращаясь к уравнению Гамильтона, ищут непосредственно такие матрицы \bar{p} и \bar{q} , удовлетворяющие условию

$$\bar{p}\bar{q} - \bar{q}\bar{p} = \frac{h}{2\pi i} \bar{1},$$

которые данную гамильтонову функцию $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ обращают в диагональную матрицу. Такая постановка вопроса выгодна еще в том отношении, что является возможность из найденного для какого-нибудь конкретного случая решения матричной задачи получить

(*) Ибо по определению,

$$\dot{\bar{q}} = \left(\frac{d}{dt} q(n, m) e^{2\pi i \nu(n, m) t} \right) = (2\pi i \nu(n, m) q(n, m) e^{2\pi i \nu(n, m) t})$$

и

$$\begin{aligned} (\bar{H}\bar{q} - \bar{q}\bar{H})(n, m) &= \sum_{k=1}^{k=\infty} H(n, k) q(k, m) - \sum_{k=1}^{k=\infty} q(n, k) \cdot H(k, m) = \\ &= H(n, n) q(n, m) - q(n, m) H(m, m), \end{aligned}$$

так как все $H(k, r)$ при $r \neq k$ равны нулю.

новые. Напр., если найдено решение (\bar{p}_0, \bar{q}_0) , удовлетворяющее условию $\bar{p}_0 \bar{q}_0 - \bar{q}_0 \bar{p}_0 = \frac{h}{2\pi i} \bar{1}$ и обращающее функцию $\bar{H}_0(\bar{p}_0, \bar{q}_0)$ в диагональную матрицу, то от переменных \bar{p}_0 и \bar{q}_0 можно путем некоторого преобразования перейти к новым — \bar{P}, \bar{Q} , которые тоже удовлетворяют условию

$$\bar{P}\bar{Q} - \bar{Q}\bar{P} = \frac{h}{2\pi i} \bar{1},$$

но обращают в диагональную матрицу уже не $\bar{H}_0(\bar{P}, \bar{Q})$, а другую гамильтонову функцию $\bar{H}(\bar{P}, \bar{Q})$, и тем самым дают решение для нового случая (*). Нахождение в каждом частном случае того преобразования, которое позволило бы перейти от уже известного решения (\bar{p}_0, \bar{q}_0) к другому, соответствующему гамильтоновой функции $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ заданного вида, представляет собой задачу, до некоторой степени аналогичную решению уравнения Гамильтона-Якоби в классической механике.

§ 4.

Приложим общую теорию к гармоническому осциллятору. Гамильтонова функция его имеет вид

$$[41] \quad \bar{H} = \frac{1}{2m} \bar{p}^2 + m \frac{x^2}{2} \bar{q}.$$

Отсюда:

$$\dot{\bar{p}} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{q}} = -m x^2 \bar{q},$$

$$\dot{\bar{q}} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{m} \bar{p},$$

г.-е.

$$[42] \quad \ddot{\bar{q}} + x^2 \bar{q} = 0.$$

Переход к элементам матриц дает:

$$\left\{ -[2\pi\nu(n, k)]^2 + x^2 \right\} q(n, k) = 0,$$

или, если положить $\frac{x^2}{4\pi^2} = \nu_0^2$:

$$[43] \quad [\nu^2(n, k) - \nu_0^2] q(n, k) = 0.$$

(*) Такие преобразования, в известной мере, соответствуют каноническим преобразованиям обычной механики.

$q(n, k)$, поэтому, может быть отлично от нуля только тогда, когда

$$[44] \quad v(n, k) = \pm v_0 = \frac{H_n - H_k}{h}.$$

Так как можно показать, что все матричные уравнения инвариантны относительно одновременной одинаковой перестановки строк и столбцов, при которой диагональные элементы матриц произвольным образом могут быть перемещаемы вдоль главной диагонали, то мы можем считать величины H_m расположенными по главной диагонали в порядке возрастающей величины.

Тогда, как показывает формула [44], два смежных значения H_m и H_{m+1} отличаются друг от друга на $h\nu_0$, а так как минимальное значение H_m — это (в силу выбранного нами расположения) $H_1 = H(1, 1)$, то вообще:

$$[45] \quad H_n = H(n, n) = H(1, 1) + (n - 1)h\nu_0.$$

[44] дает теперь:

$$[44^1] \quad v(n + 1, n) = v_0 = -v(n, n + 1), \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

а [43] показывает, что только $q(n + 1, n)$ и $q(n, n + 1)$ ($1 \leq n \leq \infty$) отличны от нуля.

Используем теперь условие [28]:

$$\bar{p} \bar{q} - \bar{q} \bar{p} = \frac{h}{2\pi i} \bar{1}.$$

Так как в рассматриваемом случае гамильтонова функция имеет вид

$$\bar{H}(\bar{p}, \bar{q}) = \bar{H}_1(\bar{p}) + \bar{H}_2(\bar{q}),$$

то, как было показано выше (см. § 2), равенство нулю всех членов матрицы $\bar{p} \bar{q} - \bar{q} \bar{p}$, кроме диагональных, является непосредственным следствием уравнений Гамильтона, а потому ничего нового дать не может. Диагональные же элементы дают, если принять во внимание, что $\bar{p} = m\dot{q}$:

$$\begin{aligned} \frac{h}{2\pi i} &= \sum_{k=1}^{k=\infty} [p(n, k)q(k, n) - q(n, k)p(k, n)] = \\ &= -2\pi i m \sum_{k=1}^{k=\infty} [v(k, n) |q(k, n)|^2 - v(n, k) |q(n, k)|^2] = \\ &= -4\pi m i [v(n + 1, n) |q(n + 1, n)|^2 + v(n - 1, n) |q(n - 1, n)|^2] \\ &\quad (n = 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

При $n=1$ получается просто:

$$\frac{h}{2\pi i} = -4\pi m i v_0 |q(2, 1)|^2,$$

т. е.

$$[46] \quad |q(2, 1)|^2 = \frac{h}{8\pi^2 m v_0},$$

а так как из предыдущей формулы имеем

$$[47] \quad |q(n+1, n)|^2 = |q(n, n-1)|^2 + \frac{h}{8\pi^2 m v_0}, \quad (n=2, 3, 4, \dots)$$

то

$$[48] \quad |q(n+1, n)|^2 = n \cdot \frac{h}{8\pi^2 m v_0}.$$

Остается найти возможные уровни энергии $H_r = H(r, r)$. [41] дает:

$$\begin{aligned} H(r, r) &= 4\pi^2 m v_0^2 \sum_{k=1}^{\infty} |q(r, k)|^2 = \\ &= 4\pi^2 m v_0^2 \{ |q(r, r-1)|^2 + |q(r, r+1)|^2 \} = \\ [49] \quad &= 4\pi^2 m v_0^2 \cdot (2r-1) \cdot \frac{h}{8\pi^2 m v_0} = \left(r - \frac{1}{2}\right) h v_0. \end{aligned}$$

Минимальная энергия равна

$$H(1, 1) = \frac{1}{2} h v_0.$$

а это не что иное, как «Nullpunktenergie» Планка.

Заканчивая на этом настоящее, по необходимости, весьма краткое изложение основ новой квантовой теории, укажем еще лишь на некоторые достигнутые с помощью ее результаты. К таковым относятся, прежде всего, вывод формул Крамерсовой теории дисперсии, полученных им раньше путем «квантового истолкования» (Umdeutung) соответствующих классических формул. В новой механике они получаются без труда по методу, совершенно аналогичному обычному методу возмущений. Далее, обобщение новой механики на системы со многими степенями свободы дало возможность теоретически вывести формулы Бальмера (Pauli), g -формулу Ланде и т. д.

Не имея возможности входить здесь в рассмотрение как этих вопросов, так и той тесной связи, которая существует между теориями Гейзенберга и Шредингера, отсылаем интересующихся этим к существующей литературе, а также (по поводу последнего пункта) к помещенной в настоящем сборнике статье проф. В. Р. Бурсиана о волновой механике.

АНАЛОГИЯ МЕЖДУ МЕХАНИКОЙ И ОПТИКОЙ

Н. Н. АНДРЕЕВ

Между волновой механикой Шредингера и механикой классической существует соотношение, подобное соотношению между геометрической и волновой оптикой; с другой стороны, между классической механикой и геометрической оптикой можно провести довольно полную аналогию. Поэтому возможно пытаться перейти к волновой механике от механики классической путем обобщения, соответствующим переходу от геометрической оптики к волновой, как это и делает Шредингер в своей второй статье (*).

1. Прежде всего покажем, что для случая распространения волны малой длины из основного уравнения волновой оптики:

$$[1] \quad \Delta\Phi = \varphi \operatorname{div} \operatorname{grad} \Phi = \frac{n^2}{c^2} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}$$

получается основное уравнение геометрической оптики.

Если интересующее нас решение [1] мы будем искать в виде:

$$[2] \quad \Phi = \varphi(x, y, z) \cdot e^{2\pi i \nu \left(t - \frac{n}{c} \Psi(x, y, z) \right)} = \varphi e^{ikf},$$

то результат его подстановки в [1] таков:

$$\frac{1}{(ck)^2} \Delta\varphi + \frac{1}{ik} \left[2 \operatorname{grad} kf \cdot \operatorname{grad} \varphi + \varphi \Delta kf \right] + \varphi \operatorname{grad}^2 kf = \frac{n^2}{c^2} \varphi \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2.$$

Для весьма коротких волн (большое k) уравнение обращается в уравнение

$$[3] \quad \operatorname{grad}^2 f = \frac{n^2}{c^2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2,$$

(*) F. Schroedinger, Quantisierung als Eigenwertproblem. Zweite Mitteilung. Ann. d. Phys. 79, 489. 1926.

первого порядка, но второй степени. Однако, чтобы было возможно отбросить первый и второй члены предыдущего уравнения, необходимо соблюдение некоторых условий. Если, напр., значения амплитуд φ расположены в пространстве так, что в двух рядом лежащих точках φ имеет весьма разное значение, то $\text{grad } \varphi$ здесь очень велик; такой случай представляет граница тени и света; при этом наблюдаются явления дифракции, и уравнение [3] уже не достаточно для их описания. Точно так же по близости фокуса лучей Δf очень велик, так как (*)

$$\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial N^2} + \frac{1}{s} \frac{\partial f}{\partial N}$$

(N — нормаль, s — средний радиус кривизны поверхности $f = \text{const.}$). Значит, только при небольшой по сравнению с длиной волны кривизне волновой поверхности возможно заменить [1] на [3].

Совершенно к такому же уравнению [3] мы приходим и в случае распространения волн в неоднородной среде, где n есть функция места; только к вышеперечисленным ограничениям приходится добавить еще одно: чтобы n мало изменялось на расстояниях порядка длины волны, определяемой частотою ν .

Надо, однако, отметить, что в неоднородной среде уравнение [1], вообще говоря, не имеет места; напр., в теории Максвелла для компонента электрической или магнитной силы получается совсем другое уравнение. Если поэтому в своей волновой механике Шредингер и приходит к уравнению [1], но с переменным n , то истолковать его как уравнение распространения какой-то электромагнитной волны — невозможно.

2. Уравнение [3] показывает, что каждая точка поверхности $f = \text{Const.}$ перемещается с течением времени в пространстве в направлении $\pm \text{grad } f$ со скоростью $\frac{c}{n}$.

В самом деле

$$\partial f = 0 = \frac{\partial f}{\partial t} dt + dr \text{ grad } f;$$

в направлении $\text{grad } f$ имеем:

$$0 = \frac{\partial f}{\partial t} dt + dr \cdot |\text{grad } f|$$

(*) См., напр., Ignatowsky, Vectoranalysis, Bd. I. p. 85.

или из [3]:

$$\left| \frac{dr}{dt} \right| = \frac{c}{n}.$$

Двузначность направления соответствует известному положению геометрической оптики, что замена луча на обратный совместима с законами преломления. Однако наше уравнение [3] еще содержит понятие скорости, совершенно изгоняемое геометрической оптикой, оперирующей только с геометрическим понятием луча. Поэтому в [3] мы имеем дело с уравнением *примитивной волновой оптики* в духе принципа Гюйгенса, как он изложен им самим.

К геометрической оптике в собственном смысле этого слова мы перейдем, положив, как было выше

$$f = t - \frac{n\psi}{c}.$$

Тогда вместо [3] найдем *основное уравнение геометрической оптики*:

$$[4] \quad \text{grad}^2 \frac{n\psi}{c} = \frac{n^2}{c^2}.$$

Так как поверхность равных фаз есть $n\psi = \text{const.}$, то направление луча света естественно определить единичным вектором R , удовлетворяющим условию:

$$[5] \quad R = \frac{\text{grad} \frac{n\psi}{c}}{\left| \text{grad} \frac{n\psi}{c} \right|} = \frac{c}{n} \text{grad} \frac{n\psi}{c}.$$

Только с этим вектором и оперирует геометрическая оптика; очевидно, вместо [4] основное уравнение геометрической оптики можно написать и так:

$$[6] \quad \text{curl} \frac{nR}{c} = 0.$$

3. Из [5] или [6] легко вывести основной принцип геометрической оптики, — *принцип Фермата*.

В самом деле (dr — элемент пути между точками A и B),

$$[7] \quad \int_A^B \frac{nR}{c} \cos \alpha \cdot dr = \int_A^B \frac{nR}{c} \cdot dr = \int_A^B \text{grad} \frac{n\psi}{c} \cdot dr = \left(\frac{n\psi}{c} \right)_B - \left(\frac{n\psi}{c} \right)_A.$$

Если путь интегрирования совпадает с ходом луча, то $\cos \alpha = 1$, и интеграл

$$\int_A^B \frac{nR}{c} dr = \int_A^B \frac{n}{c} dr.$$

Если же этот путь *мало отличается* от пути луча, то $\cos \alpha$ отличается от единицы на величину второго порядка малости, а потому интеграл по этому пути отличается от предыдущего также на величины второго порядка малости, т.-е. *стационарен*:

$$[8] \quad \delta \int_A^B \frac{n}{c} dr = 0,$$

что и выражает *принцип Фермата*. Этот принцип — чисто геометрического характера; и в геометрии ему аналогично условие, определяющее геодезическую линию в неевклидовом пространстве. Полагая (эйштейновы обозначения!):

$$[9] \quad \frac{n}{c} = \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{dx_\mu}{dr} \cdot \frac{dx_\nu}{dr}}$$

мы видим непосредственно, что [8] выражает условие, определяющее геодезическую линию.

Становясь на точку зрения примитивной волновой оптики, где $h = \frac{c}{v}$, находим:

$$[10] \quad \delta \int_A^B \frac{dr}{v} = \delta \int_A^B dt = 0$$

другую форму того же принципа, собственно и принадлежащую Фермату.

Интеграл [8], взятый по пути луча, есть функция точек A и B ; эта функция, введенная в оптику впервые Гамильтоном (1824), а позднее, когда работы Гамильтона были основательно забыты, получившая название *эйконала*, — эта функция $V(A, B)$ дает возможность решить любую задачу геометрической оптики, не прибегая к решению дифференциального уравнения [3], и в этом ее значение. Сравнивая [8] и [10], находим:

$$[11] \quad V(A, B) = \frac{c}{n} (t_B - t_A),$$

а это уравнение представляет собою, очевидно, гюйгенову элементарную волну вокруг точки A , соответствующую времени распро-

странения света $\Delta t = t_B - t_A$. В самом деле, применив к интегралу [8] теорему о среднем значении, можем написать:

$$\int_A^B \frac{n}{c} \cdot dr = (n) \frac{r_{BA}}{c} = \frac{(n)}{c} \cdot \Delta r.$$

Здесь (n) есть среднее значение n ; обозначив (v) среднее значение скорости, можем положить:

$$[12] \quad \Delta r = \frac{c}{(n)} \Delta t = (v) \cdot \Delta t.$$

Следовательно, если закрепим точку A , то [12] есть уравнение кривой замкнутой поверхности, близкой к шару с радиусом $(v)\Delta t$ и при увеличении Δt растущей во все стороны; получим:

$$V(r_A, r_B) = (v)\Delta t,$$

$$V(r_A + \delta r_A, r_B) = V(r_A, r_B) + (\text{grad } V \cdot \delta r)_A = (v)\Delta t,$$

при чем δr_A стеснено условием лежать на поверхности волны:

$$\left(\frac{n\psi}{c} \right)_A = \text{Const.},$$

т.-е. должно удовлетворять условию:

$$\left(\text{grad} \frac{n\psi}{c} \cdot \delta r \right)_A = 0.$$

Решение этого уравнения совместно с первыми двумя дает возможность исключить координаты точки A из первого уравнения, в результате чего и получается, как известно, уравнение огибающей. Но вычитанием из второго уравнения первого находим:

$$(\text{grad } V \delta r)_A = 0.$$

Варируя V при постоянном Δt , находим поэтому:

$$(\text{grad } V \delta r)_B = 0,$$

а из вариации [7] при тех же условиях следует:

$$\left(\text{grad} \frac{n\psi}{c} \cdot \delta r \right)_B = 0;$$

отсюда вытекает параллельность $(\text{grad } V)_B$ и $(\text{grad } \frac{n\psi}{c})_B$; наша поверхность, полученная исключением из первого уравнения координат A , следовательно, совпадает с поверхностью

$$\left(\frac{n\psi}{c}\right)_B = \left(\frac{n\psi}{c}\right)_A + (v)\Delta t.$$

4. Так как вся геометрическая оптика содержится в [8], а примитивная волновая оптика в [10], то при установлении аналогии между механикой и оптикой удобно исходить из вариационных принципов механики. Напомним поэтому их содержание.

Принцип Гамильтона гласит:

$$[13] \quad \delta \int_{t_A}^{t_B} (T - U) dt = 0,$$

где $T = \frac{mv^2}{2}$ — кинетическая энергия, U — потенциальная, зависящая в интересных для нас задачах только от положения точки. Отсюда известным способом получаются уравнения механики (*):

$$[14] \quad \frac{dG}{dt} = \frac{dmv}{dt} = -\text{grad } U.$$

Исключая из [13] U при помощи уравнения энергии

$$W = T + U,$$

находим т. н. принцип Мопертюи (собственно принадлежащий Эйлеру): (**)

$$[15] \quad \delta \int_{t_A}^{t_B} 2T \cdot dt = 0.$$

(*) При вариировании удобно пользоваться векторными обозначениями: напр. $\delta U = \text{grad } U \cdot \delta r$ и т. д.

(**) Надо отметить, что только из принципа Эйлера-Мопертюи нельзя получить уравнений движения; но, прибавив к нему знание потенциальной энергии в зависимости от координат, мы уже сможем это сделать. Вариирование производится при *постоянном* W .

Замечая, что

$$2 T = m v \cdot v = Gv,$$

вместо [13] можем написать:

$$[16] \quad \delta \int_{t_A}^{t_B} Gv \cdot dt = \delta \int_A^B G \cdot dr = 0.$$

Наконец, из [15] путем исключения времени при помощи соотношения:

$$T^2 = (W - U) \frac{m}{2} \left(\frac{dr}{dt} \right)^2$$

или

$$T = \sqrt{\frac{m}{2}} \sqrt{W - U} \frac{dr}{dt}$$

находим чисто геометрический принцип Якоби:

$$[17] \quad \delta \int_A^B \sqrt{2m(W - U)} dr = 0.$$

Вариирование этого выражения при данном W дает нам пути нашей точки, естественно ничего не давая относительно скоростей.

Сравнивая [16] с [8], мы видим полную аналогию: *нахождение траектории движения точки, имеющей полную энергию W и движущейся в поле U , равносильно нахождению траектории светового луча, движущегося в среде с показателем преломления*

$$[18] \quad n = \sqrt{2m(W - U)}.$$

Таким образом, решив некоторую задачу геометрической оптики, мы тем самым решили и задачу нахождения траектории точки. Напр., при $n = Const.$ находим

$$U = Const.;$$

пути луча света и точки — прямые линии. В поле тяготения $U = gz$, траектории точки — параболы; аналогично заключаем, что пути лучей в среде с показателем преломления

$$n = \sqrt{2(W - gz)},$$

уменьшающимся с подъемом, — также параболы. Как и в оптике, мы можем далее характеризовать траекторию вектором R или градиентом некоторой функции S .

Но, как видим, здесь дело идет только о *геометрических* соотношениях. Если мы хотим найти аналогию механике, то должны искать ее в *примитивной волновой оптике*, а не в оптике геометрической.

Однако мы здесь сейчас же наталкиваемся на затруднение. Именно, если рассматривать в [17] подынтегральное выражение, как

$n = \frac{c}{v}$, то мы должны положить:

$$[19] \quad v = \frac{c}{n} = \frac{c}{\sqrt{2m(W-U)}} v,$$

тогда как в механике имеем

$$[20] \quad v = \sqrt{\frac{2T}{m}} = \frac{\sqrt{2m(W-U)}}{m}$$

Иначе говоря, из нашей аналогии мы приходим к скорости, обратной по величине к действительной скорости. Именно в этом пункте и потерпела крушение ньютонова теория истечения, по существу представлявшая перенесение механических представлений в область световых явлений.

Не входя в способ возможного истолкования этого противоречия (он разбирается в следующей статье), будем, однако, продолжать нашу аналогию. Обозначим интеграл, удовлетворяющий уравнению [17] через S :

$$[21] \quad S = \int_A^B \sqrt{2m(W-U)} dr$$

Очевидно, S есть функция r_B , r_A и W , со свойствами, подобными функции V в уравнении [11]. Сравнивая [21] и [17], можем написать:

$$S(A, B, W) = F(t_B, t_A);$$

закрепляя далее t_A , t_B и A , видим, что *при данной энергии* эту формулу можно истолковать как элементарные волны Гюйгенса: как и ранее, из S можно, следовательно, получить и вид фронта волны и направление лучей, т.-е. траекторий.

5. Нетрудно составить дифференциальное уравнение для S . Для этого заметим, что при постоянном W :

$$[22] \quad \delta S = (\text{grad } S \cdot \delta \mathbf{r})_B + (\text{grad } S \delta \mathbf{r})_A;$$

но, с другой стороны, варьируя равный функции S интеграл

$$\int_A^B \mathbf{G} \cdot d\mathbf{r},$$

находим, принимая во внимание уравнения движения и неизменность W :

$$\delta S = (\mathbf{G} \delta \mathbf{r})_B - (\mathbf{G} \delta \mathbf{r})_A.$$

Из сравнения с [21] видим, что

$$[23] \quad \text{grad}_B S = \mathbf{G}_B; \quad \text{grad}_A S = -\mathbf{G}_A.$$

Так как далее:

$$W = T + U = \frac{1}{2m} \mathbf{G}^2 + U,$$

откуда и находим:

$$[24] \quad \frac{1}{2m} \text{grad}^2 S + U = W,$$

дифференциальное уравнение в частных производных Гамильтона-Якоби, полный интеграл которого и есть функция S . Так как, будучи иначе написано:

$$[25] \quad \text{grad}^2 S = 2m(W - U),$$

это уравнение совершенно сходно с [4], то аналогия выступает ярко.

В динамике, как известно, пользуются также другой функцией S^* , определяемой:

$$[26] \quad S^* = \int_{t_A}^{t_B} (T - U) \cdot dt.$$

Функция эта, очевидно, зависит от A, B, t_A, t_B .

В динамике показывается, что она удовлетворяет уравнению:

$$[27] \quad \frac{\partial S^*}{\partial t} + \frac{1}{2m} \text{grad}^2 S^* + U = 0,$$

при чем между S^* и S существует соотношение:

$$S^* = S - W(t_B - t_A).$$

Уравнение [27] уже не имеет себе аналога в примитивной волновой оптике, управляемой уравнением [3]. Это обстоятельство существенно, и на него следует обратить внимание при оценке рассуждений Шредингера, поскольку они базируются на аналогии между механикой и геометрической оптикой.

ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА ШРЕДИНГЕРА

В. Р. БУРСИАН

Если мы попытаемся обозреть положение учения о квантах к моменту возникновения новых теорий Гейзенберга, Дирака и Шредингера, т.-е. примерно к концу 1925 года, то мы найдем, с одной, стороны ряд весьма твердо установленных фактов, а с другой стороны — теорию, которая после многообещающего начала зашла в некоторый тупик, упершись отчасти в непреодолимые математические трудности, начинающиеся уже с атома гелия (задача о трех телах), отчасти в противоречия с опытом (половинные квантовые числа в полосатых спектрах, ионизационный потенциал гелия по методу возмущений). Существенным для нашего изложения является факт существования ряда дискретных энергетических уровней в атомных и молекулярных системах и возможности воздействовать на них внешним электромагнитным полем. Теоретическая трактовка этой стороны явлений до сих пор была следующая: строилась механическая модель из материальных точек, электронов и протонов с соответствующими зарядами, и по ньютоновой механике или, в случае надобности, по механике принципа относительности изучались движения этой системы. После этого вступал в действие совершенно немеханический элемент — процесс квантования, посредством которого из непрерывной совокупности возможных механических движений выделялись особые движения, которые рассматривались как стационарные состояния данной модели. Энергии этих выделенных движений и представляли теоретические значения энергетических уровней. В этом формальном наложении двух чуждых друг другу принципов заключается принципиальный недостаток старой квантовой теории. Созданная Шредингером «волновая» механика свободна от этого упрека; она не квантует, а автоматически дает ряд дискретных чисел и соответствующих им состояний.

Для достижения этого результата Шредингеру пришлось создать совершенно новый круг представлений, совершенно новые механи-

ческие объекты и соотношения между ними. Тем более удивительно, что подход к этим соотношениям до некоторой степени является обобщением положений классической механики, и притом в направлении, уже предугазанном работами Гамильтона и Ф. Клейна, с одной стороны, и идеями Л. де-Броуля — с другой. По статье Г. А. Грипберга читатель имел возможность ознакомиться с попыткой Гейзенберга отказаться от обычных пространственно-временных представлений об основных механических величинах — координатах и моментах, и создать отвлеченную систему математических *понятий* (матрицы), только формально сопоставляемых этим величинам. Вместо обычных аналитических операций над последними вводится метод матричного исчисления, и в окончательном результате получается не описание движения электронов, принципиально, по мнению авторов, не наблюдаемого, а лишь действительно наблюдаемые интенсивности и поляризации испускаемых частот. В отличие от этого, теория Шредингера (поступая, быть может, еще радикальнее) оперирует новыми *представлениями*, заменяя механическую проблему движения электрона проблемой волн или стоячих колебаний некоторого «механического скаляра»; зато входящие в рассмотрение величины мыслятся в нашем обычном круге представлений пространства и времени. Однако этой, казалось бы, столь существенной разнице двух теорий не следует придавать пока особого значения. Для случая более чем одного электрона волны Шредингера суть волны в пространстве многих измерений (пространстве независимых координат модели), так что обе теории в сущности дают формальные рецепты, каким образом от некоторой исходной точки, классического уравнения Гамильтона-Якоби, следует вести математические операции для получения конечного результата, при чем доказано, что в тех случаях, когда мы умеем решать задачу по обеим теориям, результаты эти должны совпадать. Не особенно существенно, конечно, и то обстоятельство, что теория Шредингера пользуется математическим аппаратом более общеизвестным и изученным, чем теория бесконечных матриц, а именно сводит вопрос к разысканию характеристических чисел и фундаментальных функций, появляющихся при интегрировании дифференциальных уравнений с предельными условиями. Единственно, что можно сказать в пользу теории Шредингера, это то, что она, повидимому, может быть с успехом применена к решению таких задач, к которым пока еще принципиально затруднительно применить матричное исчисление.

Переходя к изложению основ теории Шредингера, мы воспользуемся рассмотренной в статье Н. Н. Андреева аналогией между механикой и оптикой, которая была известна уже Гамильтону.

Уравнение в частных производных Гамильтона-Якоби для случая свободного движения материальной точки может быть написано следующим образом:

$$[1] \quad \frac{\partial S}{\partial t} + H \left(\frac{\partial S}{\partial x_k}, x_k \right) = 0.$$

Здесь координаты обозначены под ряд через x_1, x_2, x_3 ; H есть функция Гамильтона, которая в том случае, когда она не содержит явно времени, тождественна с выражением энергии точки $T + \Phi$, выраженной в координатах и моментах x_k и p_k

$$H(p_k, x_k) = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \varphi(x_1, x_2, x_3),$$

при чем

$$p_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_k} = m \dot{x}_k,$$

где $T(\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3) = T(p_1, p_2, p_3)$ есть кинетическая, а $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ — потенциальная энергия. В уравнении [1] буквы p_k в выражении H заменены частными производными некоторой функции S по x_k . Полагая

$$[2] \quad S = -Et + W(x_k),$$

мы приводим уравнение [1] к виду

$$[3] \quad H \left(\frac{\partial W}{\partial x_k}, x_k \right) = E.$$

Пусть у нас найден какой-нибудь интеграл уравнения [3], т.-е. функция $W(x_k)$, обращающая его в тождество. С одной стороны, мы можем на этот результат смотреть так: если мы определим поле вектора скорости уравнениями:

$$[4] \quad \dot{x}_k = \frac{1}{m} \frac{\partial W}{\partial x_k}; \quad v = \sqrt{\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2} = \frac{1}{m} |\text{grad } W|,$$

то линии этого поля определяют нам некоторое семейство возможных траекторий точки, соответствующих движению с заданной энергией E .

С другой стороны, мы можем рассмотреть семейство поверхностей

$$[5] \quad W(x_k) = S + Et$$

и ввести в рассмотрение некоторую функцию $\psi(S)$.

При данном t эта функция будет постоянна вдоль каждой из поверхностей семейства [5] и меняться от поверхности к поверхности. Для другого $t' = t + \Delta t$ то же самое значение S будет связано с другой поверхностью, именно

$$[6] \quad W(x_k) = S + Et' = (S + Et) + E\Delta t.$$

Можно сказать, что данное значение S перемещается со временем от одной поверхности семейства [5] к другой, а можно выразить это и иначе, сказав, что поверхность постоянного S перемещается в пространстве, деформируясь так, чтобы в каждый данный момент совпадать с одной из поверхностей [5]. Если мы представим себе функцию $\psi(S)$ как периодическую функцию

$$[7] \quad \psi(S) = Ae^{2\pi i \frac{S}{h}} = Ae^{-2\pi i \left(\frac{E}{h} t - \frac{W(x_k)}{h} \right)},$$

то получится картина системы бегущих волн, при чем $\frac{S}{h}$ является фазой. Величина h введена в [7] для соблюдения размерности; так как S имеет размерность действия, то и h должно иметь эту размерность, чтобы в показателе стояло абсолютное число. Величина $\frac{E}{h} = \nu$ является частотой этой волны.

Расстояние между поверхностями [5] и [6], взятое по нормали, есть

$$[8] \quad \Delta s = \frac{E\Delta t}{|\text{grad } W|},$$

как что скорость распространения фазы (зависящая от координат точки) равна

$$[9] \quad V = \frac{E}{|\text{grad } W|}.$$

Ортогональные траектории поверхностей одинаковой фазы в оптике изотропных сред (т.-е. если V не зависит от направления) мы называем лучами. На доказательстве изотропности нашей «среды», а также на возможности формулировать для наших «волн» принцип Гюйгенса мы не останавливаемся; укажем только на то, что в силу того, что W определяется из уравнения в частных производных, форму одной из поверхностей семейства [5] можно выбрать по произволу, и тогда все семейство [5] определяется однозначно.

Всякому интегралу $W(x_k)$ соответствует, следовательно, с одной стороны семейство возможных траекторий точек, а с другой — фазовая волна, лучи которой совпадают с этими траекториями. В точеч-

ной механике мы обращаем внимание на одну определенную траекторию, соответствующую определенным начальным данным, т.-е. на один определенный луч; исследование волны [7] соединяет в одно целое свойства определенного семейства таких лучей-траекторий. В этой аналогии есть один недостаток: скорость точки [4] в данном месте траектории и фазовая скорость [9] волны в той же точке пространства не совпадают. Для этого обстоятельства можно найти также соответствующую оптическую аналогию. Определим длину волны из обычного соотношения

$$\lambda = \frac{V}{\nu} = \frac{h}{|\text{grad } W|}.$$

Из уравнения [4] мы можем выразить $|\text{grad } W|$ через количество движения или момент p :

$$\text{grad } W = \vec{mv} = \vec{p}.$$

В свою очередь, p можно выразить через энергию:

$$E = \frac{1}{2m} p^2 + \varphi,$$

$$p = \sqrt{2m(E - \varphi)}.$$

Таким образом, окончательно

$$[10] \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - \varphi)}}.$$

Точно также и V можно представить, на основании [9], в виде

$$[11] \quad V = \frac{E}{\sqrt{2m(E - \varphi)}}.$$

Так как E непосредственно связано с частотой, то мы видим, что наши волны обладают дисперсией; поэтому можно ввести в рассмотрение, кроме фазовой скорости V , еще групповую скорость v' , которая определяется на основании кинематики волнового движения формулой

$$[12] \quad v' = V - \lambda \frac{dV}{d\lambda}.$$

V и λ как функции E нам известны (φ в данной точке постоянно); поэтому v' легко вычислить, и получается

$$[13] \quad v' = \sqrt{\frac{2(E - \varphi)}{m}}.$$

Легко показать, что это равняется v , т.-е. что скорость точки на траектории имеет свою оптическую аналогию, именно групповую скорость.

До сих пор мы рассматривали «оптику» как аналогию к механике; но можно поступить и наоборот: в оптике мы имеем дело с волнами, но при свободном распространении света мы можем материализовать наши лучи (т.-е. ортогональные траектории), заставив бежать по ним материальные частицы, световые частицы Ньютона.

Вплоть до разногласия в понятии скорости мы можем пользоваться этим представлением во всей области, где применима геометрическая оптика, и применять точечную механику (как это на самом деле и делал Ньютон) для расчета оптических явлений. Но известно, что волновая теория смогла пойти гораздо дальше ньютоновой теории в описании явлений дифракции. Дифракция получается тогда, когда оптические неоднородности среды имеют размеры, сравнимые с длиной волны; здесь понятие о лучах теряет свою силу. Наша «среда», в которой распространяются волны функции ψ , тоже «оптически» неоднородна, так как фазовая скорость по [9] зависит не только от частоты (через E), но и от координат (через φ). Известно, что для внутриатомных движений точечная механика оказалась непригодной; если стать на ту точку зрения, что и в механике нужно от корпускулярной точки зрения перейти к волновой, то можно видеть причину несостоятельности точечной механики в том, что в атомах мы имеем тоже своего рода дифракцию, т.-е. что для описания этих явлений нужно рассматривать волны не как искусственно придуманную картину, а как суть дела; точечную же механику — как картину, пригодную только в том случае, когда дифракцией «механических волн» можно пренебречь.

Эта догадка приводит к такому вопросу: какое значение нужно придать неопределенной пока величине h , чтобы длина волны, соответствующая внутриатомным движениям электрона, оказалась сравнимой с размерами атомных полей. Рассмотрим случай обращения электрона вокруг ядра атома водорода на расстоянии порядка радиуса атома ($a = 5 \cdot 10^{-9}$ см), при чем, так как мы хотим именно показать непригодность точечной механики, наш расчет будет лишь грубо приближителен. Для момента количества движения mva точечная механика даст в этом случае значение порядка $\frac{h_0}{2\pi}$, где h_0 постоянная Планка. Это следует, конечно, независимо от старой квантовой теории из величины радиуса орбиты и силового поля атома.

Количество движения $p = mv$ будет равно $\frac{h_0}{2\pi a}$; отсюда по [10] получаем

$$\lambda = \frac{2\pi ah}{h_0}.$$

Отношение длины волны к размеру атома ($2a$) получается равным

$$\frac{\lambda}{2a} = \pi \frac{h}{h_0},$$

и если мы хотим, чтобы несостоятельность точечной механики или эквивалентной ей «случевой оптики» объяснялась дифракцией, мы должны придать величине h значение порядка h_0 . В виду универсальности h_0 весьма естественна гипотеза, что $h = h_0$, т.-е. что величина h , введенная для соблюдения размерности, и есть постоянная Планка, которую мы впредь будем обозначать через h . Наоборот, приняв эту гипотезу, мы сразу видим, что точечная механика не может описать атомных процессов, так как она есть только геометрическая оптика «механических волн», а при атомных размерах нужно развивать теорию дифракции этих волн. Заметим, что соотношение

$$[14] \quad E = h\nu, \quad \nu = \frac{E}{h}$$

приобретает вид закона Эйнштейна-Бора. Конечно, особого содержания мы пока в него вложить не можем, поскольку классическая механика не определяет абсолютного значения энергии.

Довольно естественно поставить вопрос, какое могло бы быть настоящее уравнение, определяющее функцию ψ или фазу S , и для которого уравнение Гамильтона является лишь приближением для *малых длин волн*, так как вместо того, чтобы говорить о больших размерах неоднородностей, мы можем говорить о малых длинах волн как о предельном случае, при котором исчезает дифракция. Сделаем опять-таки довольно естественную гипотезу, что таким уравнением является обычное волновое уравнение

$$[15] \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_3^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0,$$

где V означает фазовую скорость, зависящую от координат (*). Положим далее, обобщив несколько выражение [7],

$$[16] \quad \psi = \psi_0(x, y, z) e^{-2\pi i \left(\nu t - \frac{Q(x, y, z)}{h_0} \right)},$$

(*) Заметим, что, написав уравнение [15], мы отступаем от проведения строгой аналогии с оптикой, так как для неоднородной среды оптическое волновое уравнение более сложно.

где λ_0 некоторая постоянная длина, которую определим как длину волны при данной частоте и при некотором нормальном значении V_0 , например, там, где силовое поле данной модели исчезает. Отношение

$$\frac{V_0}{V} = \frac{\lambda_0}{\lambda} = n$$

назовем по аналогии с оптикой показателем преломления. Подставляя [16] в [15], получаем после элементарных выкладок:

$$[17] \quad \Delta\psi_0 + \frac{4\pi i}{\lambda_0} (\text{grad } \psi_0 \cdot \text{grad } Q) + \frac{2\pi i}{\lambda_0} \psi_0 \Delta Q + \left(\frac{2\pi i}{\lambda_0}\right)^2 \psi_0 (\text{grad } Q)^2 = \\ = \left(\frac{2\pi i v}{V}\right)^2 \psi_0.$$

Положив здесь

$$\frac{v}{V} = \frac{1}{\lambda}$$

и умножив уравнение на $\left(\frac{\lambda_0}{2\pi i}\right)^2 \cdot \frac{1}{\psi_0}$, получим:

$$[18] \quad \left(\frac{\lambda_0}{2\pi i}\right)^2 \frac{\Delta\psi_0}{\psi_0} - \frac{i\lambda_0}{\pi} \frac{1}{\psi_0} (\text{grad } \psi_0 \text{ grad } Q) - \frac{i\lambda_0}{2\pi} \cdot \Delta Q + (\text{grad } Q)^2 = n^2.$$

Если λ_0 будет стремиться к нулю, то в пределе получим

$$[19] \quad (\text{grad } Q)^2 = n^2.$$

Величина Q стоит в тесной связи с эйконалом геометрической оптики. Сравнивая выражения [7] и [16], мы видим, что Q и W отличаются на постоянный множитель, а частота ν должна быть связана с энергией

$$W = \frac{hQ}{\lambda_0}; \quad \nu = \frac{E}{h}.$$

Для того, чтобы [19] совпало с уравнением Гамильтона-Якоби [3], которое напомним в виде

$$\frac{1}{2m} (\text{grad } W)^2 + \varphi = E,$$

достаточно положить

$$n^2 = \frac{2m\lambda_0^2}{h^2} (E - \varphi).$$

Отсюда для V получаем

$$\frac{1}{V^2} = \frac{n^2}{V_0^2} = \frac{2m}{h^2} \left(\frac{\lambda_0}{V_0}\right)^2 (E - \varphi) = \frac{2m}{h^2 v^2} (E - \varphi) = \frac{2m(E - \varphi)}{E^2}.$$

после чего можем написать волновое уравнение:

$$[I] \quad \Delta\psi - \frac{2m(E - \varphi)}{E^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0.$$

В приложениях всегда разыскиваются решения типа

$$\psi = \psi_0 e^{-2\pi i \frac{E}{h} t}.$$

Подставляя это в [I], получим уравнение для амплитуд:

$$[II] \quad \Delta\psi_0 + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - \varphi) \psi_0 = 0.$$

Это и есть то уравнение, которым Шредингер пользуется для решения задач о стационарных состояниях атомных систем.

Заметим, что переход от волнового уравнения [15] к уравнению [19], которое мы признали эквивалентным классическому уравнению Гамильтона-Якоби, является вполне однозначным; обратный же переход от [19] именно к [15], а не к какой-нибудь другой форме уравнения второго или более высокого порядка, — является, как мы уже указали, гипотезой, лежащей в основе теории.

Укажем формальный рецепт, каким образом можно из уравнения Гамильтона-Якоби в форме [3] получить уравнение [II].

Заменим в выражении

$$H(p_k x_k) - E = 0$$

все буквы p_k символами $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}$; произведем все алгебраические действия, например,

$$(p_k)^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$$

и применим к каждому члену полученного многочлена справа функцию ψ_0 ;

если этот член содержит символ $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}$ в какой-нибудь степени n , то символическое произведение $\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}\right)^n \psi_0$ читается как

$\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^n \frac{\partial^n \psi_0}{\partial x^n}$; члены, не содержащие символического множителя, просто умножаются на ψ_0 . Это правило кратко формулируется так.

Выражение

$$H(p_k, x_k) - E,$$

где H есть функция Гамильтона обычной точечной механики, для данной задачи рассматривается как оператор с вышеуказанным

значением букв p_k и применяется к неизвестной функции ψ_0 ; получаемый результат приравнивается нулю:

$$[\text{III}] \quad [H - E, \psi_0] = 0.$$

Нетрудно проверить, что это для случая прямоугольных прямолинейных координат действительно приводит к уравнению [II]. О том, как писать его в других координатах, мы скажем в дальнейшем.

Следуя Шредингеру, мы провели наше изложение, основываясь на форме функции Гамильтона, как она дается классической механикой в предположении постоянства массы. Исходя из точечной механики принципа относительности, можно провести совершенно аналогичные рассуждения. Чтобы вместе с тем расширить круг применения теории, включим в рассмотрение действие магнитного поля на частицу (электрон). Исходя из функции Лагранжа

$$L = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - e\varphi + \frac{e}{c} (\vec{v} \cdot \vec{A}),$$

получаем выражения для канонических моментов:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} = \frac{m_0 \dot{x}_k}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + \frac{e}{c} A_k$$

и, разрешив эти уравнения относительно скоростей, образуем по общему правилу механики

$$H = \sum p_k \dot{x}_k - L(p_k, x_k) = H(p_k, x_k).$$

Это уравнение удобнее всего писать в виде неявного выражения

$$[\text{20}] \quad \sum_k (p_k - \frac{e}{c} A_k)^2 - \frac{1}{c^2} (H - e\varphi)^2 + m_0^2 c^2 = 0.$$

Легко проверить, что

$$H = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + e\varphi = E_k + E_p,$$

где E_p для случая, когда φ и A от времени не зависят, т.-е. для статических полей, есть потенциальная энергия, а E_k есть энергия движения, которая приближенно выражается разложением:

$$E_k = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 v^2 + \dots$$

и для случая покоя переходит в $E_0 = m_0 c^2$ — энергию покоящейся массы m_0 . Всех рассуждений, изложенных в предыдущем, повторять не будем, а применим для перехода к волновой механике рецепт оператора. После некоторых выкладок получим:

$$[IV] \Delta \psi_0 - \frac{4\pi i}{h} \frac{e}{c} (\vec{A} \text{ grad } \psi_0) - \frac{4\pi^2}{h^2 c^2} [m_0^2 c^4 + e^2 A^2 - (E - e\varphi)^2] \psi_0 = 0.$$

Напишем:

$$E = m_0 c^2 + (E - m_0 c^2) = E_0 + E'.$$

E' есть разность между полной энергией и энергией электрона, покоящегося вне силового поля, т.-е. как раз та величина, которая в ньютоновой механике рассматривается как энергия и, как таковая, была введена в уравнения [I], [II] и [III]. Легко убедиться, что последний член может быть приведен к виду

$$+ \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} \left[(E' - e\varphi) + \frac{e^2 A^2}{m_0 c^2} + \frac{(E' - e\varphi)^2}{2m_0 c^2} \right] \psi_0.$$

Если мы здесь положим $\vec{A} = 0$ и отбросим третий член, который всегда очень мал (механическая энергия E' при существующих полях и скоростях мала по отношению к энергии покоя $m_0 c^2$), то мы получим в точности уравнение [II]; поэтому мы можем смотреть на уравнение [IV] как на естественное обобщение уравнения [II] для механики принципа относительности. Уравнение [IV] было указано О. Клейном и В. А. Фоком.

По поводу основного уравнения волновой механики нам остается еще рассмотреть вопрос о преобразовании координат; оказывается, что при переходе к новым координатам рецепт «оператора» является не однозначным. Нельзя просто рассматривать преобразованное к новым координатам уравнение Гамильтона - Якоби как оператор; преобразуя [II] или [IV] непосредственно, можно получить результат, отличный от того, который дает [III]. Инвариантный по отношению к преобразованиям координат вид уравнения проще всего получить, если найти вариационную задачу, решением которой является данное уравнение, при чем подынтегральная функция варьируемого интеграла должна быть координатным инвариантом.

Для уравнения [II] Шредингер указывает следующий прием: если пользоваться декартовыми координатами, то вариационная задача:

$$\delta F = \delta \int \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial \psi_0}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_0}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_0}{\partial x_3} \right)^2 \right] + \psi_0^2 \varphi(x_k) \right\} dx_1 dx_2 dx_3 = 0$$

при условии, что интеграл распространен на все пространство, и что функция ψ_0 подчинена условию:

$$\int \psi_0^2 dx_1 dx_2 dx_3 = 1,$$

дает уравнение [II] с параметром E как лагранжевым множителем добавочного условия.

При переходе к другим координатам (q_k), очевидно, нужно ввести якобиан преобразования; вместе с тем кинетическая энергия

$$T(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2),$$

с которой связан первый член подынтегральной функции, преобразуется в квадратичную функцию новых моментов:

$$T = \frac{1}{2} \sum_r \sum_s a_{rs}(q_k) p_r p_s.$$

Оказывается, что дискриминант этой формы равен единице, деленной на квадрат якобиана преобразования координат. Обозначая его через Δ_p , получаем для любых координат вариационную задачу в виде

$$\delta F = \delta \int \left\{ \frac{h^3}{4\pi^2} \left[T(p_k, q_k) \right] + \psi_0^2 \varphi(q_k) \right\} \frac{(dq_k)}{\sqrt{\Delta_p}} \quad \left(p_k = \frac{\partial \psi_0}{\partial q_k} \right)$$

при

$$\int \psi_0^2 \frac{(dq_k)}{\sqrt{\Delta_p}} = 1,$$

а решением ее является дифференциальное уравнение

$$[III] \quad \sqrt{\Delta_p} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} \left(T_k(p_s, q_s) \right) + \frac{8\pi^2}{h^2} \left[E - \varphi(q_k) \right] \psi_0 = 0,$$

$$\left(p_s = \frac{\partial \psi_0}{\partial q_s} \right),$$

где символ T_k означает частную производную выражения $T(p_k, q_k)$ по букве p_k . Обозначение (dq_k) введено как сокращение для произведения $dq_1 dq_2 \dots dq_n$.

Для механики принципа относительности (а также и классической) В. А. Фоком указан другой прием: в уравнении Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H \left(\frac{\partial S}{\partial q_k}, q_k \right) = 0$$

следует положить $\frac{\partial S}{\partial t} = -E \frac{\partial \psi}{\partial t}$; $\frac{\partial S}{\partial q_k} = -E \frac{\partial \psi}{\partial q_k}$.

Умножением левой части уравнения на $(\frac{\partial \psi}{\partial t})^2$ получается выражение:

$$Q = \frac{1}{2} \sum_r \sum_s Q^{rs} \frac{\partial \psi}{\partial q_r} \frac{\partial \psi}{\partial q_s} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \sum_s p_s \frac{\partial \psi}{\partial q_s} + R \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2.$$

Требование, чтобы

$$\delta \int_{t_1(q_k)}^{t_2} Q (dq_k) dt = 0$$

при условии исчезновения вариации ψ на границах области или на границах промежутка времени, дает волновое уравнение в инвариантном виде, а после подстановки

$$\psi = \psi_0 e^{-2\pi i \frac{E}{h} t}$$

дает уравнение для амплитуд ψ_0 в виде [П'] или обобщения [IV] на какие угодно координаты, в зависимости от вида взятой функции Гамильтона. Ссылаясь на статью В. К. Фредерикса, ограничимся лишь указанием на то, что О. Клейну и В. А. Фоку удалось придать выводу уравнений как точечной, так и волновой механики значительно большую стройность и законченность переходом к пятимерному сверхмиру.

Все предыдущие рассуждения без труда можно обобщить на случай системы точек, если только удастся написать соответствующее выражение для функции Гамильтона. Но если мы пожелаем полученное волновое уравнение с числом координат более трех и его решение в виде

$$\psi = \psi_0(x_1, \dots, x_{3N}) e^{-2\pi i \left(\frac{E}{h} t - Q(x_1, x_2, \dots, x_{3N}) \right)}$$

представить себе наглядно, то мы встречаемся с таким затруднением: это не есть положение N волн в пространстве трех измерений, а одна волна в пространстве $3N$ измерений, если наша система состоит из N точек. Другими словами, нельзя сказать, что волновая механика заменяет частицы волнами; подобное конкретное истолкование математической стороны теории Шредингера возможно только для случая движения одной частицы.

Если функции ψ придавать какое-то, хотя и в настоящее время не вполне ясное, физическое значение, то вполне естественно то требование, которое налагает Шредингер на искомое решение; именно, он требует, чтобы решение было во всей области изменения независимых координат *конечным, однозначным и непрерывным*. Оказывается, что этих требований достаточно, чтобы из всех возможных частных решений уравнения [II] или [IV] выделить ряд дискретных решений. Эти требования равносильны предписанию определенных предельных условий для решений дифференциального уравнения, без которых задача, формулированная в виде дифференциального уравнения, вообще остается неопределенной. Никаких новых операций «квантования» теория Шредингера не производит.

Иногда условия Шредингера не дают дискретных решений; в таком случае возможен непрерывный ряд состояний нашей модели, эти состояния не квантованы.

В качестве первого примера рассмотрим с точки зрения волновой механики задачу, которая соответствует движению свободной материальной точки без действия сил, т.-е. по инерции. Потенциальную энергию мы приравняем нулю, и непосредственно из [IV] напишем основное уравнение нашей задачи:

$$[21] \quad \Delta\psi_0 + \frac{4\pi^2}{h^2 c^2} (E^2 - E_0^2) \psi_0 = 0.$$

Как легко проверить, это есть уравнение для амплитуды периодической волны с частотой $\frac{E}{h}$, удовлетворяющей во всем пространстве волновому уравнению

$$[22] \quad \Delta\psi - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0,$$

где V при заданной энергии имеет постоянное значение

$$[23] \quad V = \frac{E \cdot c}{\sqrt{E^2 - E_0^2}}.$$

Известно, что любое, во всем пространстве конечное, решение этого волнового уравнения можно составить из наложения плоских волн

$$[24] \quad \psi = A e^{-2\pi i \left(\frac{E}{h} t - \frac{zx + \beta y + \gamma z}{V} \right)}.$$

Каждое такое частное решение по волновой механике изображает движение частицы по инерции с энергией E и с направлением движения, определяемым косинусами углов нормали волны с осями коор-

динат. Собственно говоря, изображается движение не одной частицы, а вся совокупность возможных движений по данному направлению и с данной энергией. Значение E и направление (α, β, γ) ничем не ограничены; значит, поступательное движение по инерции в теории Шредингера не квантуется. Скорость частицы, имеющей энергию E , по механике принципа относительности получается из

$$E = \frac{E_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

равной

$$[23] \quad v = c \frac{\sqrt{E^2 - E_0^2}}{E},$$

и можно показать, что [23] есть групповая скорость при фазовой скорости V , даваемой выражением [23], которое включает в себе закон дисперсии этих волн, так как $E = h\nu$, и при подстановке этого соотношения в [23] мы получаем зависимость V от ν .

В этом простом случае волновая механика дает результаты, которые уже раньше были получены Л. де-Брольи, и которые в действительности послужили отправной точкой Шредингеру при создании его теории. В виду той роли, которую соображения де-Брольи сыграли в истории возникновения новой механики, мы их здесь вкратце изложим. Де-Брольи исходил из утверждения, что всякой энергии соответствует определенная частота по соотношению

$$E = h\nu.$$

Покоящемуся электрону с массой m_0 и энергией $E_0 = m_0 c^2$ можно сопоставить поэтому частоту некоторого процесса, описываемого уравнением

$$[26] \quad \psi = A \cdot e^{-2\pi i \frac{E_0}{h} t}.$$

Истолкуем это как синхронные колебания функции ψ во всем пространстве. Конечно, синхронными они будут только для наблюдателя, покоящегося вместе с электроном; для всякого другого наблюдателя, перед которым электрон движется со скоростью v по оси x , этот процесс представится в его координатах и времени x' и t' иначе. По формуле преобразования Лоренца:

$$t = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \left(t' - \frac{vx'}{c^2} \right),$$

а потому выражение [26] преобразуется в

$$\psi' = A \cdot e^{-2\pi i \cdot \frac{E_0}{V \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} (t' - \frac{v}{c^2} x)},$$

что изображает волну с частотой

$$\nu = \frac{E_0}{h \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{E}{h},$$

где E есть энергия электрона с точки зрения второго наблюдателя, и с фазовой скоростью

$$V = \frac{c^2}{v} = \frac{c E}{\sqrt{E^2 - E_0^2}},$$

где вместо v подставлено его выражение [25].

Заметим, что частота ν меньше всего для покоящегося электрона, но и для него она очень велика:

$$\nu_0 = \frac{E_0}{h} = \frac{m_0 c^2}{h} = \frac{9 \cdot 10^{-28} \cdot 9 \cdot 10^{20}}{6,56 \cdot 10^{-27}} = 1,2 \cdot 10^{26}.$$

Эта частота для света соответствовала бы длине волны в $2,4 \cdot 10^{-10}$ см, т.-е. $24 XE$, или жестким лучам γ . Механическая же длина волны, наоборот, при $v = 0$ равна бесконечности.

Заметим также, что так как $E - E_0$ мало по сравнению с энергией покоя E_0 , то фазовая скорость волн де-Брогли значительно больше скорости света.

В втором примере рассмотрим случай вращения вокруг неподвижной осн. Здесь вся энергия кинетическая; за координату, определяющую положение ротатора, возьмем угол φ поворота вокруг осн.

$$E = T = \frac{1}{2} M \dot{\varphi}^2 = \frac{1}{2M} p_{\varphi}^2,$$

где M есть момент инерции, а p_{φ} — момент количества движения и вместе с тем канонический момент в смысле Гамильтона. Дискриминант квадратичной формы T есть $\frac{1}{2M}$, и, применяя правило, заключенное в уравнении [17], получаем, по выполнении выкладок

$$[27] \quad \frac{d^2 \psi_0}{d\varphi^2} + \frac{8\pi^2 M E}{h^2} \psi_0 = 0.$$

Это уравнение формально не отличается от [21] для «движения по инерции», если мы там предположим, что ψ_0 зависит только от одной координаты.

Напишем общий его интеграл в вещественном виде:

$$\psi_0 = A \cos \left(\sqrt{\frac{8\pi^2 ME}{h^2}} \varphi + \delta \right).$$

Эта функция для всех значений φ конечна и непрерывна, но если мы потребуем, чтобы она была *однозначна в реальном пространстве*, то очевидно, что она должна удовлетворять требованию периодичности, т.-е.

$$\psi_0(\varphi + 2k\pi) = \psi_0(\varphi).$$

А это может иметь место только тогда, когда коэффициент при φ под знаком косинуса равен целому числу. Таким образом требование физической однозначности приводит к ограничению возможных значений параметра E , входящего в уравнение; из равенства

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 ME}{h^2}} = n$$

следует:

$$E = E_n = \frac{h^2}{8\pi^2 M} n^2.$$

Только эти дискретные значения E_n дают допустимые, с точки зрения Шредингера, решения; ротатор квантуется, и притом в данном случае совершенно так же, как и в старой квантовой теории.

Третьим примером возьмем пространственный ротатор, т.-е. систему двух точек, находящихся на неизменном расстоянии друг от друга. Чтобы не рассматривать поступательного движения (что не представляет, однако, никаких затруднений), предположим, что система вращается около неподвижно закрепленного центра инерции. В сферических координатах и канонических моментах кинетическая, т.-е. в данном случае полная, энергия дается выражением:

$$E = T = \frac{1}{2A} \left(p_\varphi^2 + \frac{p_\theta^2}{\sin^2 \theta} \right),$$

где A — момент инерции. Опуская выкладки, составляем по [II'] уравнение Шредингера:

$$[28] \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi_0}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 AE}{h^2} \psi_0 = 0.$$

В том случае, когда

$$[29] \quad \frac{8\pi^2 AE}{h^2} = n(n+1) = \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4},$$

где n есть целое число, решение [28] есть шаровая функция Лапласа Y_n , и из теории шаровых функций известно, что только при условии [29] решение [28] будет конечно, непрерывно и однозначно на всей сфере. Значит, пригодные для нас решения получаются только тогда, когда

$$[30] \quad E = E_n = \frac{h^2}{8\pi^2 A} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{h^2}{32\pi^2 A}.$$

Разность двух значений энергии пропорциональна разности квадратов не целых чисел, а чисел вида $\left(n + \frac{1}{2} \right)$. Дробные квантовые числа здесь появляются столь же естественно, как в других случаях целые. В спектроскопии молекулярных (полосатых) спектров «полуторные» или «половинные» квантовые числа пришлось ввести на основании эмпирических данных, при чем старая квантовая теория объяснить этого не могла.

Рассмотрим еще четвертый пример — движение одного электрона вокруг неподвижного положительного ядра с N -кратным зарядом, или, вернее, задачу волновой механики, соответствующую этой модели. Функция Гамильтона в сферических координатах есть

$$H(p, q) = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) - \frac{e^2 N}{r};$$

уравнение Шредингера по [11], т. е. без принципа относительности, приводится к виду

$$[31] \quad \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial \psi_0}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi_0}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2 N}{r} \right) \psi_0 = 0.$$

Полагая

$$\psi_0 = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi),$$

можем разделить обычным образом переменные, после чего получается:

$$[32] \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + a Y = 0,$$

$$[33] \quad \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} + \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2 N}{r} \right) - \frac{a}{r^2} \right] r^2 R = 0.$$

Первое уравнение есть уравнение шаровых функций и имеет конечные и однозначные решения, если

$$[34] \quad a = n(n+1), \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

Второе уравнение было подробно исследовано Шредингером, который показал, что оно имеет решения конечные и непрерывные во всей области $0 \leq r \leq \infty$, если $E > 0$, что, по точечной механике, соответствует незамкнутым гиперболическим орбитам. Если же $E < 0$ (замкнутые эллиптические орбиты точечной механики), то, вообще говоря, таких решений нет, за исключением особых значений параметра E , равных

$$[35] \quad E_l = -\frac{2\pi^2 m e^4 N^2}{h^2} \cdot \frac{1}{(l+1)^2},$$

где $l \geq n$ и число целое. Наименьшее возможное значение l есть нуль, при чем n также нуль. Это соответствует одноквантовой орбите по Бору, как это видно из выражения для E_l . Каждому числу l соответствует $l+1$ возможных значений n , но энергия зависит только от одного квантового числа l . Число $l+1$ есть главное квантовое число Бора. Заметим, что в этом и предыдущем примерах мы имеем дело с системами, по старой терминологии, вырожденными: энергия зависит от меньшего числа квантовых чисел, чем число степеней свободы. И этот результат получается здесь автоматически.

Разобранные примеры показывают ясно, в чем состоит суть дела. Условия конечности, непрерывности и однозначности являются своего рода предельными условиями задачи, в дифференциальное уравнение которой входит параметр E . Решение подобных задач сводится к разысканию *характеристических чисел*, т.-е. тех значений параметра E , при которых решение, удовлетворяющее условиям, вообще возможно, и *фундаментальных функций*, т.-е. именно тех решений, которые получаются при этих частных значениях параметра E . С математической стороны этого вопроса читатель может ознакомиться по статье В. А. Фока.

Кроме рассмотренных здесь задач, по теории Шредингера решались еще следующие: водородный атом с магнитным полем, а также по принципу относительности — В. А. Фоком; гармонический вибратор, пространственный ротатор с колебаниями атомов, его составляющих, — Шредингером; та же задача, но более детально Фюссом, который рассматривал также вопрос об интенсивностях в полосатых спектрах; водородный атом в электрическом поле — сперва В. А. Фоком, затем с подробным рассмотрением вопроса об интенсивностях — Шредингером. Шредингер и Фюсс развили теорию приближенного вычисления возмущений, создаваемых прибавкой внешнего поля или вообще появлением новых малых членов в дифференциальном уравнении уже решенной задачи. В последней

статье Шредингер распространяет свою теорию на случай возмущающих сил, зависящих от времени; при этом ему приходится несколько обобщить волновое уравнение. Наконец, Борн применил теорию Шредингера к вопросу о столкновении электронов с атомом.

К сожалению, мы вынуждены отказаться от сколько-нибудь математически последовательного изложения решений этих задач; надеемся, однако, что изложенные выше общие основания и примеры дадут читателю возможность, обратившись к оригинальным статьям, в каждом отдельном случае ясно понять постановку математической задачи. Существенно, однако, остановиться на одной принципиальной стороне теории, которой мы до сих пор еще совершенно не касались, именно на вопросе об интенсивности испускаемого атомными системами света, появляющегося, по старой терминологии, при переходе атома из одного состояния в другое.

На основании соображений принципа соответствия матричная теория Гейзенберга, Борна и Иордана, как известно из статьи Г. А. Гринберга, трактует член матрицы x , соответствующей декартовой координате x ,

$$[36] \quad x(rs) = x^0(rs) e^{-\frac{2\pi i}{h}(E_r - E_s)t}$$

как колебание фиктивного классического вибратора, испускающего ту световую волну, которая, по старой терминологии Бора, сопутствует переходу атома с уровня энергии E_r на уровень E_s . Величины E_r и E_s — члены диагональной матрицы энергии. Квадрат модуля [36], $|x^0(rs)|^2$ является мерой интенсивности данного колебания.

В изложенной до сих пор части теории Шредингера мы интересовались только характеристическими числами E_s , толкуя их как энергии, соответствующие тем частным «собственным колебаниям» скаляра ψ , которые нам заменяют прежние «движения по дискретным орбитам». Изучение этих собственных колебаний, т. е. фундаментальных функций, дающих пространственное распределение амплитуды при данном собственном колебании, дало возможность установить совершенно отчетливо формальную связь между ними и теми величинами, которые в матричной механике были истолкованы как интенсивности.

Предположим, что для данной задачи найдены все характеристические числа E_k (можно доказать, что если они существуют, то их бесконечное число) и соответствующие им фундаментальные функции ψ_k^0 .

Предположим далее, что коэффициенты в нашем уравнении вещественны, и что функции ψ_k^0 также вещественны. Тогда частными решениями нашей задачи являются собственные колебания:

$$\psi_k = \psi_k^0 e^{-i 2\pi \frac{E_k}{h} t}.$$

Удобнее рассматривать решения именно в этом комплексном виде, хотя на самом деле решением является вещественная (или мнимая) часть функции ψ_k . Введем также в рассмотрение сопряженные функции

$$\psi_k^* = \psi_k^0 e^{i 2\pi \frac{E_k}{h} t}.$$

В общей теории фундаментальных функций доказывается, что функции ψ_k^0 обладают свойством ортогональности, т.-е.

$$[37] \quad \int \rho \psi_k^0 \psi_s^0(dx) = 0, \quad (k \neq s)$$

где ρ есть некоторая функция, определяемая видом дифференциального уравнения; интеграл берется по всей области координат x_1, x_2, \dots , а (dx) означает произведение всех дифференциалов $dx_1 dx_2 \dots$. Так как уравнение и предельные условия однородны, то функции ψ_k^0 определены вплоть до постоянного множителя, который можно определить так, чтобы

$$[38] \quad \int \rho (\psi_k^0)^2(dx) = 1.$$

В таком случае мы говорим, что функции ψ_k^0 составляют бесконечный ряд ортогональных нормированных функций. Вводя вместо ψ_k^0 функции ψ_k , можем написать

$$[39] \quad \int \rho \psi_k \psi_s^*(dx) = \begin{cases} 0, & (k \neq s) \\ 1, & (k = s) \end{cases}$$

Возьмем любую функцию координат $F(x_r)$, составим все выражения вида

$$[40] \quad F(ks) = \int F(x_r) \rho \psi_k \psi_s^*(dx) = e^{-2\pi i \frac{(E_k - E_s)}{h} t} \int F \rho \psi_k^0 \psi_s^0(dx)$$

и рассмотрим их как члены бесконечной матрицы, сопоставленной функции F . В частности для координаты x_r получим матрицу с членами

$$[41] \quad x_r(ks) = e^{-2\pi i \frac{(E_k - E_s)}{h} t} \int x_r \rho \psi_k^0 \psi_s^0(dx).$$

Эти матрицы имеют эрмитов характер, также как и матрицы Гейзенберга и Борна, т.-е.

$$x_r(ks) = x_r^*(sk).$$

Далее, если у нас имеется выражение $H(p, x_r)$, например, функция Гамильтона, то ему можно сопоставить матрицу с членами

$$[42] \quad H(ks) = \int \rho \psi_s^* [H, \psi_k](dx)$$

где $[H, \psi_k]$ есть тот самый оператор, смысл которого мы указывали раньше. В частности величине p_r соответствует матрица с членами

$$[43] \quad p_r(ks) = \frac{h}{2\pi i} \int \rho \psi_s^* \frac{\partial \psi_k}{\partial x_r}(dx) = \frac{h}{2\pi} e^{-i\left(2\pi k \frac{(E_k - E_s)}{h} t + \frac{\pi}{2}\right)} \int \rho \psi_s^* \frac{\partial \psi_k^0}{\partial x_r}(dx).$$

Легко показать, пользуясь свойством ортогональности, что $p_r(ks)$ также будет эрмитовой матрицей.

Шредингер доказывает, что все действия над этими матрицами производятся точно так же, как над матрицами Гейзенберга и Борна; самое существенное свойство их заключается в следующем. Если мы возьмем матрицы p_k и x_k , определенные в [41] и [43], и напомним выражение $H(p_k, x_k)$ в виде матричной функции $H(p_k, x_k)$, подставим сюда наши p_k и x_k и произведем по правилам матричного исчисления все действия, то в результате получим некоторую матрицу. С другой стороны, мы можем вычислить матрицу [42], соответствующую выражению $H(p_k, x_k)$; эти две матрицы совпадают.

Легко показать, что если $H(p_k, x_k)$ есть классическая функция Гамильтона нашей задачи в декартовых координатах, то вычисленная матрица [42] будет диагональная матрица, при чем диагональные ее члены будут как раз характеристические числа.

Действительно: функции ψ_k^0 должны тождественно удовлетворять уравнению [III]:

$$[H - E_k, \psi_k^0] = 0, [H, \psi_k^0] = E_k \psi_k.$$

Поэтому

$$H(ks) = e^{-i2\pi \frac{(E_k - E_s)}{h} t} \int \rho \psi_s^0 E_k \psi_k^0(dx) = \begin{cases} 0. & (k \neq s) \\ E_k. & (k = s) \end{cases}$$

в силу ортогональности и нормировки функций ψ_k^0 . Теперь уже очень легко показать полную эквивалентность теорий Шредингера и матричной; если задача Шредингера решена, т.-е. известны все E_k и ψ_k^0 , то, по доказанному, нам остается только построить матрицы p_k и x_k , чтобы получить те их выражения, которые обращают

матричное выражение функции Гамильтона, $H(\mathbf{p}_k \mathbf{x}_k)$, данной задачи в диагональную матрицу, при чем значения диагональных ее членов уже известны заранее — это характеристические числа задачи Шредингера. Матрицы \mathbf{p}_k и \mathbf{x}_k , построенные по [41] и [43], решают задачу Гейзенберга и Борна. Если считать, что члены матрицы \mathbf{x}_k действительно связаны с интенсивностью испускаемого света, то тем самым и в теории Шредингера вопрос о вычислении интенсивностей можно считать формально решенным, так как эти величины могут быть вычислены.

Чтобы рассмотреть этот вопрос на примере, обратимся к случаю гармонического линейного вибратора. Функция Гамильтона имеет вид:

$$H(p, x) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} \pi^2 \nu_0^2 m x^2 = E.$$

Посредством процесса квантования старая квантовая теория находила уровни энергии

$$E_n = nh\nu_0.$$

и возможные частоты испускаемого света по принципу Бора должны были быть:

$$\nu(n, m) = \frac{E_n - E_m}{h} = (n - m) \nu_0,$$

т.е. целые кратные основной частоты ν_0 . Старой теории приходилось теперь обращаться к новому принципу, к принципу соответствия, также указанному Бором, для того чтобы совершить отбор среди всех возможных перескоков и запретить все те, при которых разность чисел n и m превышает единицу, т.е. дополнить результат еще правилом отбора

$$n - m = 1.$$

Это, конечно, есть не что иное, как утверждение относительно интенсивностей: интенсивности, соответствующие дозволенным переходам, равны между собой, а прочие равны нулю.

В данном случае рассуждения очень просты: для больших квантовых чисел n и m квантовые законы должны давать результат, асимптотически приближающийся к классическому; но, по классической теории, наш вибратор может испускать только одну частоту ν_0 , поэтому должно быть

$$n - m = 1.$$

Распространяя это на все квантовые числа, получаем нужный результат.

Приступим теперь к решению задачи по Шредингеру. Уравнение для ψ_0 легко составить (по [III]):

$$[44] \quad \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - 2\pi^2\nu_0^2x^2)\psi_0 = 0.$$

Вводя

$$a = \frac{8\pi^2Em}{h^2}, \quad b = \frac{16\pi^4\nu_0^2m^2}{h^2}, \quad z = x\sqrt[4]{b},$$

приводим уравнение к виду:

$$[45] \quad \frac{d^2\psi_0}{dz^2} + \left(\frac{a}{\sqrt{b}} - z^2\right)\psi_0 = 0.$$

Произведем на самом деле разыскание характеристических чисел и фундаментальных функций этого уравнения, при предельных условиях: ψ_0 конечно при $-\infty \leq z \leq +\infty$.

Для этого вводим новую функцию y уравнением

$$\psi_0 = e^{-\frac{z^2}{2}} y$$

и полагаем $\frac{a}{\sqrt{b}} = 2n + 1$. Уравнение [45] приводится к виду.

$$[46] \quad y'' - 2zy' + 2ny = 0.$$

Пологая

$$y = \sum_0^{\infty} a_k z^k$$

и определяя коэффициенты, получаем

$$y = a_0 \left(1 - \frac{2n}{1 \cdot 2} z^2 + \frac{2n(2n-4)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} z^4 - \dots \right) + a_1 z \left(1 - \frac{(2n-2)}{1 \cdot 2 \cdot 3} z + \frac{(2n-2)(2n-6)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5} z^3 - \dots \right).$$

Так как это выражение имеет два неопределенных коэффициента a_0 и a_1 , то это есть общий интеграл:

$$y = a_0 y_n^{(1)} + a_1 y_n^{(2)}.$$

Если n равно положительному целому числу или нулю, то один из этих рядов обрывается и представляет собой целый полином, который называется полиномом Эрмита H_n ; можно показать, что произведение

$$e^{-\frac{z^2}{2}} y_n^{(a)}$$

при n не целом в точках $z = \pm \infty$ не остается конечным, в то время как

$$e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z)$$

этому условию удовлетворяет. Таким образом, для каждого $n=0,1,2\dots$ существует одно решение, удовлетворяющее поставленным предельным условиям, при n не целом таких решений нет. Ряд дискретных решений

$$\psi_n^0 = C_n e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z)$$

соответствует характеристическим числам

$$\frac{a}{\sqrt{b}} = 2n + 1.$$

Подставляя обратно значения a и b , получаем для E

$$[47] \quad E_n = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Гармонический вибратор по новой механике квантуется с полужеторными квантовыми числами. Разности энергий двух состояний получаются, однако, такие же, как и раньше:

$$E_n - E_m = (n - m) h\nu_0.$$

Функция ρ в нашем случае равна единице; вычисляя

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_k^0)^2 dz = C_k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} H_k^2(z) dz = C_k^2 2^k k! \sqrt{\pi}$$

мы видим, что для нормировки нам нужно положить

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{2^k k!} \sqrt{\pi}},$$

так что нормированными ортогональными фундаментальными функциями являются

$$[48] \quad \psi_k^0 = \frac{e^{-\frac{z^2}{2}} H_k(z)}{\sqrt{2^k k!} \sqrt{\pi}}.$$

Для полиномов Эрмита имеет место формула:

$$[49] \quad z H_m(z) = \frac{1}{2} H_{m+1}(z) + m H_{m-1}(z).$$

Для функции ψ_m^0 это соотношение, как легко убедиться, переходит в:

$$z\psi_m^0 = \sqrt{\frac{m+1}{2}} \psi_{m+1}^0 + \sqrt{\frac{m}{2}} \psi_{m-1}^0.$$

Поэтому, составляя матрицу z , получим по вышесказанным правилам,

$$\begin{aligned} z(n, m) &= e^{-2\pi i \frac{E_n - E_m}{h} t} \int z \psi_n^0 \psi_m^0 dz = \\ &= e^{-2\pi i (n-m) \nu_0 t} \left\{ \sqrt{\frac{m+1}{2}} \int \psi_n^0 \psi_{m+1}^0 dz + \sqrt{\frac{m}{2}} \int \psi_n^0 \psi_{m-1}^0 dz \right\} \end{aligned}$$

На основании ортогональности функций ψ_n^0 интегралы в скобках не равны нулю только если $m = n - 1$ и $m = n + 1$; в этом случае они равны единице. Поэтому:

$$[50] \quad \begin{cases} z(n, n-1) = e^{-2\pi i \nu_0 t} \sqrt{\frac{n}{2}}, \\ z(n, n+1) = e^{+2\pi i \nu_0 t} \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \end{cases}$$

Прочие $z(n, m)$ равны нулю, т.-е. интенсивность отлична от нуля только в случае «перехода» между соседними уровнями, когда частота равна ν_0 .

Переходя от z к x умножением на $b^{-\frac{1}{2}}$, получим в точности результат ГЕЙЗЕНБЕРГА:

$$x(n, n-1) = \frac{\sqrt{h}}{2\pi \sqrt{2\nu_0 m}} V n \cdot e^{-2\pi i \nu_0 t} (*).$$

Вернемся в заключение к некоторым общим соображениям, имеющимся в литературе по теории Шредингера, о возможном физическом значении механического скаляра ψ .

Де-Брогли, а за ним и Шредингер пытались придать физическое значение изложенной в начале статьи аналогии между оптикой и механикой, стараясь создать наложением ряда волн скаляра ψ пространственно ограниченные группы волн, «волновые пакеты». Так как скорость движения таких групп формально соответствует скоростям частиц в точечной механике (по крайней мере в той области, где волновая механика допускает понятие луча), то эти

(*) При сравнении этой формулы с формулой [48] статьи Г. А. Гейзенберга нужно иметь в виду разницу в нумерации членов матрицы; у нас порядковые номера начинаются с нуля, а там — с единицы.

группы могли бы объяснить существование дискретных электронов и частиц, которые мы на самом деле наблюдаем. Для движения по инерции, а также для гармонического вибратора такие построения возможны, но общего значения эта попытка, повидимому, не имеет, хотя бы из-за многомерности волны в случае более сложных систем. По частным сведениям, Г. А. Лоренц в своих лекциях показал, что для модели водородного атома таких волновых пакетов создать нельзя.

Если стоять на почве принципа относительности, т. е. исходить из [IV], то энергии $E = E_0 + E'$ и производимые из них частоты будут очень велики; испускаемые же атомами световые частоты, равные $\frac{E_n - E_m}{h} = \frac{E'_n - E'_m}{h}$ относительно малы. Шредингер предлагал смотреть на эти частоты как на частоты биений, возникающих в том случае, когда одновременно существуют два собственных колебания. Несомненно, что акт испускания как-то связан именно с двумя состояниями, но более конкретной картины, каким образом эти биения претворяются в свет, пока не существует.

Эта идея имеет нечто общее с тем истолкованием, которое Шредингер дает формуле [41]. Если член матрицы x изображает собой некое гармоническое колебание и притом излучающее, то это должен быть периодический дипольный момент, а интеграл, стоящий в правой части [41], — его амплитуда. Оказывается возможным построить такое определение пространственного распределения плотности электричества, которое делает подобное истолкование возможным.

Если нам задано произвольное начальное состояние механического скаляра, т. е. $|\psi(x_k)|_{t=t_0}$ и $|\dot{\psi}(x_k)|_{t=t_0}$, и при том такое, которое удовлетворяет предельным условиям нашей задачи, то совершенно так же, как в задачах теории упругости, например, для случая колебания струны с неподвижными концами, мы можем представить движение, удовлетворяющее этим начальным условиям в виде разложения по собственным колебаниям

$$[51] \quad \psi = \sum_s c_s \psi_s = \sum_s |c_s| \psi_s^0 e^{-2\pi i \left(\frac{E_s}{h} t - \delta_s \right)}$$

Коэффициенты c_s , содержащие амплитуду и фазу, вообще говоря, будут комплексны.

Составим произведение $\rho\psi\psi^*$ и назовем его плотностью электричества. Тогда величина

$$[52] \quad P_x = \int x \cdot \rho\psi\psi^*(dx)$$

будет составляющей по оси x , дипольного момента этого распреде-

ления плотности. Вычислим эту величину, воспользовавшись разложением (51):

$$P_x = \sum_s \sum_k c_s c_k^* \int x \cdot \rho \psi_s \psi_k^* (dx) = \sum_s \sum_k c_s c_k^* x(sk),$$

где $x(sk)$ есть как раз член матрицы x . Для простоты опять предполагаем, что у нас имеется только одна «точка», т.-е. задача трех измерений, и координаты обозначены x, y, z ; заметим, однако, что эта гипотеза может быть без внутренних противоречий обобщена на какое угодно число координат системы. Соединяя в одно члены (sk) и (ks) , получим:

$$c_s c_k^* x(sk) + c_s^* c_k x(ks) = c_s c_k^* x(sk) + c_s^* c_k x^*(sk) = 2R(c_s c_k^* x(sk)),$$

где R означает вещественную часть. Как легко проверить,

$$R(c_s c_k^* x(sk)) = |c_s| |c_k| x^0(sk) \cos 2\pi \left(\frac{E_k - E_s}{h} t + \delta_s - \delta_k \right).$$

Таким образом

$$[53] \quad P_x = \sum_s \sum_k |c_s| |c_k| x^0(sk) \cos 2\pi \left(\frac{E_k - E_s}{h} t + \delta_s - \delta_k \right).$$

Предположим, что мы имеем только одно собственное колебание, т.-е. в разложении [51] присутствует только один член с $c_s \neq 0$, а все прочие c_k равны нулю. Тогда $P_x^{(ss)} = |c_s|^2 x^0(ss)$. Эта величина постоянна, а для гармонического вибратора равна нулю. При возбуждении одного собственного колебания атом не имеет периодического дипольного момента, а потому и не излучает. Если у нас возбуждены два собственных колебания, то, кроме двух постоянных членов, в [53] будет один периодический член (вернее, два тождественных по амплитуде и частоте, но имеющих фазы противоположных знаков, что для косинуса не имеет значения):

$$P_x^{(sk)} = P_x^{(ss)} + P_x^{(kk)} + 2|c_s| |c_k| x^0(sk) \cos 2\pi \left(\frac{E_k - E_s}{h} t + \delta_s - \delta_k \right).$$

Такой дипольный момент даст классическое излучение с должной квантовой частотой и амплитудой, пропорциональной члену матрицы Гейзенберга — Борна. В последней своей работе (4-е сообщение) Шредингер на основании этой гипотезы может вычислить дисперсию, определяя вынужденные колебания под действием световой волны, т.-е. определяя функцию ψ и вычисляя по ее разложению результирующий переменный дипольный момент. Для самопроизвольного излучения одного атома еще не совсем ясно, каким образом возникает второе собственное колебание, и почему именно только одно.

Возможно, однако, что самая постановка последнего вопроса вообще чужда самому духу теории, по крайней мере четвертому взгляду на физическую сущность функции ψ , который выдвигается Борном в его работе по теории столкновений электронов с атомами. В точечной механике полный интеграл уравнения Гамильтона-Якоби, содержащий должное число произвольных постоянных, определяет собой всю совокупность возможных движений данной модели; единичная система одновременно не может совершать все движения, а совершает только одно, но в собрании систем можно мыслить разные движения, совершаемые разными индивидуумами, и можно себе представить определенное распределение систем по различным состояниям движения. Классическая статистика как раз работает с такими распределениями, и придает каждому распределению вес, пропорциональный числу перестановок индивидуальных систем, которыми можно осуществить данное распределение. Аналогично этому можно сказать, что совокупность фундаментальных решений ψ_s задачи Шредингера есть перечисление возможных типов движения данной модели по волновой механике; на всякую же функцию ψ , которая может быть представлена в виде разложения [51], можно смотреть как на распределение множества атомов некоторого собрания по различным возможным состояниям, при чем, как показал Борн, относительное число атомов, находящихся в состоянии s , при данном «распределении» ψ пропорционально квадрату модуля коэффициента c_s , стоящего при ψ_s в разложении ψ . Сильно схематизируя, можно описать сущность упомянутой работы Борна следующим образом: на атом падает одна плоская волна, претерпевает дифракцию, и выходящая волна может быть описана на достаточном отдалении от атома как наложение плоских же волн, идущих во всех направлениях, но с интенсивностью ψ_0 , зависящей от направления. Этот результат толкуется как статистическое изображение того, что происходит при падении пучка электронов на собрание атомов, при чем интенсивность ψ_0 в бесконечно узком пучке выходящих волн толкуется как относительное число электронов, отклоненных так, что их направление после удара попадает в данный элементарный телесный угол.

С этой точки зрения дипольные моменты, вычисляемые Шредингером при задании некоторой функции ψ , вероятно, нужно себе представить как средние дипольные моменты, обуславливающие среднее лучеиспускание собрания атомов с определенным стационарным распределением по состояниям, соответствующим функции ψ . В действительности, ведь, наблюдается только то или иное

распределение интенсивности в линейчатом спектре атомов данного элемента или в полосатом спектре молекул данного соединения, испускаемого большим количеством индивидуумов при тех или иных условиях возбуждения. Если теория может вычислить это по данной модели атома из предположений о распределении по состояниям при данных условиях, то это, по мнению сторонников такой точки зрения, и есть все, что от нее принципиально можно требовать. В своих воззрениях Борн идет еще дальше, высказывая мысль, что подобная статистичность результатов лежит не в том, что мы, за большим числом единичных процессов, не можем проследить их в отдельности, а обусловлена принципиальным отсутствием детерминизма в элементарных процессах. Конечно, для какого-нибудь основательного суждения по этому вопросу в настоящее время достаточных данных не имеется.

Заметим только, по поводу последней точки зрения, что подобная абстракция, какова бы ни была ее истинная подкладка, ставит перед статистикой вопрос, как оценивать вес данного распределения, даваемого функцией ψ ? Нужно ли принципиально считать все ψ , т. е. все совокупности величин c_s^2 , которыми они в статистическом смысле вполне определяются, а priori равновероятными, или же по старому образцу производить комбинаторику тех отдельных элементарных состояний ψ_s , из которых она складывается. Первая возможность, может быть, подведет рациональный фундамент под пока еще весьма беспочвенную статистику Бозе-Эйнштейна.

Последние пункты нашего очерка показывают, что хотя физическая сторона теории Шредингера пока еще вырисовывается весьма туманно, но что эта теория, кроме весьма замечательных формальных успехов, небольшую часть которых нам здесь удалось весьма бегло изложить, дает повод к постановке очень глубоких новых проблем.

Из довольно уже обширной литературы по теории Шредингера ограничимся указанием на следующие работы.

E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. Ann. der Physik, 1926. Mitteilungen: I—79, 361; II—79, 489; III—80, 437; IV—81, 109.

E. Schrödinger. Über das Verhältnis der Heisenberg—Born—Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. Ann. der Physik, 79, 734, 1926.

L. de Broglie. Thèses. Ann. de Physique (10) 3, 22, 1925.

M. Born. Quantenmechanik der Stossvorgänge. Zeitschrift f. Physik. 38, 803, 1926.

V. Fock. Zur Schrödingerschen Wellenmechanik. Zeitschrift f. Physik, 38, 242, 1926.

O. Klein. Quantentheorie und fünfdimensionale Relativitätstheorie. Zeitschrift. f. Physik, 37, 895, 1926.

ТЕОРИЯ ШРЕДИНГЕРА И ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

В. К. ФРЕДЕРИКС

1. Основные «волновые» уравнения Шредингера, данные им сначала для решения простейших квантовых задач (осциллятора, ротатора), а затем более сложных (напр., эффект Штарка), написаны им соответственно обычным приемам классической механики и не являются инвариантными ни по отношению к преобразованиям специального принципа относительности, ни, тем более, общего. Вопрос об обобщении основоположений Шредингера для «большой» и «малой» относительности стал поэтому после первых же столь удивительных успехов теории сразу на очередь. То, что подобное обобщение могло и должно было представить весьма большой интерес, видно хотя бы из того, что работы де-Броули (de Broglie) написаны в соответствии с специальным принципом относительности, а связь и, более того, преемственная зависимость Шредингера от де-Броули неоднократно подчеркивается первым в его работах. Нельзя поэтому удивляться, что в течение всего одного только полугодия после появления первой работы Шредингера «Квантование как задача нахождения характеристических чисел» (Quantisierung als Eigenwertproblem) (*) появился целый ряд статей, специально этому вопросу посвященных. Мы коснемся здесь работ В. А. Фока (**) и О. Клейна (***). Нам следовало бы указать и на работу де-Дондера (de Donder) (****), но, за исключением некоторых его трудов, мы ограничимся первыми двумя авторами.

(*) Ann. d. Physik. März 1926.

(**) V. Fock. Zeitschr. f. Physik. 39, 226. 1926.

(***) O. Klein. Zeitschr. f. Physik. 87, 895. 1926.

(****) T. de Donder. C. R. 182, 1380. 183, 22. 183, 594. 1926.

Заметим, что «волновые» уравнения, обобщенные для принципа относительности в простейших случаях их применения, в этих различных работах по форме и выводам, из них вытекающим, совпадают, но что методы получения их неодинаковы. Заметим также, что эти методы оказываются связанными с совершенно для нас новыми физическими и геометрическими представлениями, настолько своеобразными, что требуют самостоятельной оценки и рассмотрения и имеют самодовлеющий интерес.

2. Самым естественным и простым кажется нам метод В. Фока, применяемый им к случаю движения заряженной материальной точки. Первый шаг к обобщению — обобщение в смысле специальной теории относительности. Оно основано на хорошо известном для рассматриваемого примера выражении лагранжевой функции L . В классических обозначениях:

$$[1] \quad L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c} (\mathfrak{A}v) - e\varphi,$$

где m — масса частицы, e — ее заряд, v — скорость, c — скорость света, \mathfrak{A} — вектор потенциал, φ — скалярный потенциал. В обозначениях четырехмерного тензорного анализа, при

$$x = x^1, \quad y = x^2, \quad z = x^3, \quad ct = x^4;$$

$$\frac{dx^i}{d\tau} = q^i; \quad \mathfrak{A}_i = \varphi_i \quad (\text{при } i = 1, 2, 3); \quad \varphi = -\varphi^4;$$

$$d\tau^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

имеем

$$[1'] \quad L = \left(-mc + \frac{e}{c} q^i \varphi_i \right) \frac{d\tau}{dt};$$

отсюда получается соответствующее уравнение Гамильтона-Якоби и из него выражение Q для неизвестной, введенной Шредингером, функции ψ в такой форме:

1) в классических обозначениях:

$$Q = (\text{grad } \psi)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 - \frac{2e}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} \left(\mathfrak{A} \text{grad } \psi + \frac{\varphi}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) +$$

$$[2] \quad + \left[m^2 c^2 + \frac{e^2}{c^2} (\mathfrak{A}^2 - \varphi^2) \right] \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)^2,$$

где p означает новый параметр, имеющий размерность действия.

2) В четырехмерных обозначениях:

$$[2'] \quad Q = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x^i} \right)^2 - \frac{2e}{c} \varphi^i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \frac{\partial \psi}{\partial p} + \left[m^2 c^2 + \frac{e^2}{c^2} \varphi^i \varphi_i \right] \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)^2.$$

В статье В. Р. Бурсиана значение этого выражения, в том упрощенном виде, в каком его принимает Шредингер, пояснено, и нам нет надобности давать здесь новые разъяснения. Мы замечаем, что $\frac{\partial \psi}{\partial p}$, равно как и коэффициенты при полевой, первой и второй степени от $\frac{\partial \psi}{\partial p}$ представляют собой инварианты по отношению к преобразованиям специального принципа относительности. Легко видеть, что если 1) мы возьмем мероопределение

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k,$$

2) напомним вместо [2']

$$[2''] \quad Q = g^{ik} \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \frac{\partial \psi}{\partial x^k} - \frac{2e}{c} \varphi^i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \frac{\partial \psi}{\partial p} + \left(m^2 c^2 + \frac{e^2}{c^2} \varphi^i \varphi_i \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)^2,$$

то $\frac{\partial \psi}{\partial p}$, как производная от скалара по параметру, и затем коэффициенты при $\frac{\partial \psi}{\partial p}$ в полевой, первой и второй степени будут инвариантами ко всем точечным преобразованиям в четырехмерном мире.

Выражение [2''] переходит, очевидно, в [2'], когда g_{ik} принимают значение специального принципа относительности.

Чтобы получить из [2''] обобщенное «волновое» уравнение, В. Фок замечает, что выражение для Q однородно относительно производных $\frac{\partial \psi}{\partial x^i}$ и $\frac{\partial \psi}{\partial p}$; если ввести обозначения

$$[3] \quad p = x^5; \quad \gamma^{ik} = g^{ik}; \quad \gamma^{i4} = 0; \quad \gamma^{55} = -\frac{2e\varphi^i}{c}; \quad \gamma^{55} = m^2 c^2 + \frac{e^2}{c^2} g_i g^i,$$

то выражение для Q можно написать, как сумму

$$Q = \sum_{i,k} \gamma^{ik} \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \frac{\partial \psi}{\partial x^k}. \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

Если, далее, взять пятимерную квадратичную форму

$$[4] \quad ds^2 = \sum_{i,k} \gamma^{ik} dx_i dx_k, \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

где dx_i ковариантные компоненты смещения, то форма ds^2 и Q инвариантны по отношению к одной и той же группе преобразований в R_5 , в частности обе инвариантны по всем точечным преобразованиям в R_4 . Выражение для ds^2 с контравариантными компонентами смещения будет

$$[4'] \quad ds^2 = \sum_{i,k} \gamma_{ik} dx^i dx^k \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

при

$$\gamma_{ik} = g_{ik} + \frac{e^2}{m^2 c^4} \varphi_i \varphi_k, \quad g_{i5} = 0 \quad (*) \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

Но лапласовское уравнение для ψ в пятимерном пространстве с мероопределением [4] будет, как известно,

$$[5] \quad \sum_{i,k} \frac{\partial}{\partial x^i} \sqrt{-\gamma} \gamma^{ik} \frac{\partial \psi}{\partial x^k} = 0,$$

где γ детерминант, образованный из γ_{ik} . Это и есть искомое волновое уравнение. Инвариантность полученного результата ко всем точечным преобразованиям в R_4 гарантирована здесь способом его получения.

Заметим, что в силу специальных значений γ^{ik} форма ds^2 не будет инвариантна ко всем точечным преобразованиям в R_5 . Когда g_{ik} принимают значения специального принципа относительности и когда магнитное поле отсутствует, мы получаем из [5] то самое волновое уравнение, которым пользуется Шредингер. Таким образом, поставленная задача решена. Введенное здесь пятое измерение $p = x^5$ играет в процессе решения чисто формальную, вспомогательную роль.

Однако оказывается, что пятимерное пространство с мероопределением [4] обладает некоторыми весьма замечательными свойствами.

Известно, что в общем принципе относительности движение материальной точки в поле тяготения определяется как проекция геодезической линии R_4 на трехмерное пространство, т.е. ее уравнения движения получаются из

$$\delta \int ds = 0,$$

где ds элемент дуги четырехмерного пространства. В том случае, когда «длина» геодезической равна нулю, мы имеем дело с световыми лучами.

(*) γ_{ik} вычисляется из γ^{ik} так же, как g_{ik} из g^{ik} , или обратно g^{ik} из g_{ik} в общей теории относительности.

В. А. Фок показал, что *полевые геодезические линии* *пятимерного пространства с мероопределением* [4] *определяют движение заряженной материальной точки.*

Рядом с силой тяготения, действующей на единицу массы и выступающей здесь в точно такой же форме, как в общем принципе относительности, появляется *сила Лоренца*, умноженная на отношение заряда к массе.

Другими словами: силу Лоренца можно вычислить на основании почти тех же формальных соображений, как и силу тяготения. Это обстоятельство заслуживает, конечно, внимания, в особенности, если вспомнить, что до сих пор попытки создать «единую» теорию поля для явлений тяготения и явлений электромагнитных не увенчивались успехом (*). Указанный способ вычислить силу Лоренца, быть может, дает нам указание, в каком направлении эту теорию можно пытаться построить. Но не нужно забывать, что мероопределение [4] пригодно только для данной частицы с определенными зарядом и массой.

3. Оскар Клейн (Oskar Klein) приходит в своей работе к тому же обобщенному волновому уравнению, как и Фок. Результаты его исследования изложены с помощью представления о пятимерном пространстве. Постольку, поскольку его результаты сходятся с результатами В. Фока, мы их не приводим. Мы передадим здесь возможно кратко общий ход его рассуждений, приводящий к некоторым весьма любопытным соотношениям.

Основные уравнения Эйнштейна в простейшем их виде пишутся так:

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = k T_{ik};$$

здесь R_{ik} — тензор римановой кривизны пространства, R — кривизна, T_{ik} — тензор энергии и материи и k — постоянная тяготения.

Эти уравнения можно получить с помощью вариационного принципа:

$$\delta \int (R + kL) \sqrt{-g} dw = 0,$$

где L — инвариант, зависящий от параметров, определяющих материю и входящих в тензор T_{ik} , и dw — элемент четырехмерного объема.

(*) Сюда относятся известные попытки Weyl'a, Eddington'a, самого Эйнштейна и других.

О. Клейн пробует найти в пятимерном пространстве с мероопределением

$$ds^2 = \sum_{i,k} \gamma_{ik} dx^i dx^k \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

такую функцию W , чтобы из вариационного принципа

$$\delta \int W \sqrt{-\gamma} d\Omega = 0,$$

где γ — детерминант, образованный из всех γ_{ik} , и $d\Omega$ — элемент пятимерного объема, можно было бы получить одним ударом и основные уравнения Эйнштейна (10 уравнений), и уравнения Максвелла (4 уравнения).

О. Клейн полагает:

$$\gamma_{ik} = g_{ik} + \alpha\beta^2 \varphi_i \varphi_k, \quad g_{i5} = 0. \quad (\text{при } i = 1, \dots, 5)$$

Это те же γ_{ik} , как и у Фока, с тою лишь разницей, что вместо $\frac{e^2}{m^2 c^4}$ стоит постоянный множитель $\alpha\beta^2$, который обозначается через k и значение которого заранее не предрепается. Из этих γ_{ik} строится известным способом тензор пятимерной римановой кривизны P_{ik} и кривизна $P = \gamma^{ik} P_{ik}$;

Затем полагается $W = P$ и из вариации по всем γ_{ik} , кроме γ_{55}

$$\delta \int P \sqrt{-\gamma} d\Omega = 0$$

выводятся (О. Клейн даст только результат) соотношения:

$$\left. \begin{aligned} R^{ik} - \frac{1}{2} g^{ik} R + k S^{ik} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x^i} \sqrt{-g} M^{ki} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (i, k = 1, 2, 3, 4)$$

где S^{ik} обычный электромагнитный тензор энергии и материи, а $M_{ki} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x^k} - \frac{\partial \varphi_k}{\partial x^i}$ кососимметричный тензор напряжений электрического и магнитного полей. Первые 10 уравнений на самом деле представляют собой основные уравнения Эйнштейна для пустого, не содержащего материи пространства, а вторые 4 уравнения Максвелла — также для пустого пространства.

Если оставить без рассмотрения некоторые существующие, как нам кажется, недоговоренности в выводах Клейна, то все же можно

отметить, как новый и весьма удивительный результат, что из рассмотрения одной только римановой кривизны пятимерного пространства вытекают одновременно и основные уравнения Эйнштейна, и уравнения Максвелла. Для Клейна этот результат не был, впрочем, неожиданным. В 1921 году Калюза (Kalusa) напечатал в Известиях Берлинской Академии Наук исследование (*), делавшее полученные Клейном результаты вероятными.

В дальнейшей части своей работы Клейн прибавляет к пятимерной кривизне P новый скаляр θ , с помощью которого в пустое пространство вводится материя. О. Клейн утверждает:

1) что, если

$$\theta = k \sum_{ik} \gamma_{ik} \theta^{ik},$$

где θ^{ik} обычный тензор материи, т.-е.

$$\theta^{ik} \sim \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^k}{ds},$$

то из вариационного принципа следуют обычные уравнения поля, если только положить пятую ковариантную компоненту скорости и отношение собственного элемента времени $d\tau$ в R_4 к пятимерному элементу длины ds равными соответственно подобранным постоянным;

2) что при тех же условиях движение частицы определяется положением геодезической в пятимерном пространстве.

Мы видим, что пятимерное пространство, рассматриваемое Фоком и Клейном, обладает весьма замечательными особенностями. Говорить об «единой» геометрии поля на основании этих работ, правда, пока не приходится, но для нахождения ее, как нам кажется, пройден еще один весьма важный и интересный этап — мы сказали бы, особенно интересный потому, что он тесно связан с теорией квант, подойти к которым до сего времени теория относительности не сумела. Заметим еще, что вопрос о реальности или нереальности пятого измерения не так существенен, как это может показаться с первого взгляда. Инвариантные свойства сферической поверхности в обыкновенном евклидовом пространстве могут изучаться с помощью положений обыкновенной геометрии, но они могут быть получены

(*) Th. Kalusa. Sitzungsber. d. Berl. Akad. 1921, p. 966. Аналогичное исследование было сделано у нас Г. А. Мауделем и напечатано в Zeitschr. f. Physik, 1926, v. 39, p. 136.

и как свойства сферической, не эвклидовой геометрии двумерного пространства. Подобно тому как третья координата эвклидова пространства делает изучение сферической поверхности более простым, так и в деле изучения свойств нашего четырехмерного мира пятая координата может быть лишь средством для упрощения наших выводов.

4. Теория Клейна и Фока становится весьма интересной, если сопоставить ее с теорией де-Брольи (de Broglie). Оказывается, что с помощью пятимерного пространства теории де-Брольи можно дать чрезвычайно наглядное геометрическое представление. Нам кажется поэтому полезным его здесь изложить, при чем в этом изложении мы будем следовать заметкам В. Р. Бурсиана, сделанным им после обмена мнений по этому вопросу с П. С. Эренфестом и с большою любезностью предоставленным им в мое распоряжение (*).

Рассмотрим основное «волновое» уравнение [5] т.-е.

$$[5] \quad \sum_{i,k} \frac{\partial}{\partial x^i} \sqrt{-\gamma} \gamma^{ik} \frac{d\psi}{dx^k} = 0. \quad (i, k = 1, \dots, 5)$$

Предположим пространство лишенным материи и электромагнитного поля.

Тогда

$$[5] \quad \gamma^{ik} = 1 \quad (\text{при } i, k = 1, \dots, 5)$$

$$\gamma^{44} = -1,$$

и уравнение примет вид:

$$[5] \quad \frac{\partial^2 U}{\partial x^{1^2}} + \frac{\partial^2 U}{\partial x^{2^2}} + \frac{\partial^2 U}{\partial x^{3^2}} - \frac{\partial^2 U}{\partial t^{4^2}} + \frac{\partial^2 U}{\partial x^{5^2}} = 0.$$

В этом случае, по Клейну и Фоку, заряженная частица движется так, что соответствующая движению полевая геодезическая линия в пятимерном пространстве будет прямой. Мировая линия в четырехмерном пространстве (x^1, x^2, x^3, x^4) тогда также прямая, так как представляет собой проекцию полевой геодезической на плоскость $x_5 = 0$; движение в обычном пространстве равномерно и прямолинейно. Заданные для γ^{ik} значения означают отсутствие гравитационных и электромагнитных сил, действующих на частицу.

(*) Во время печатания этой статьи появилась работа П. Эренфеста и Г. Уленбюка (см. Zeitschr. F. Physik. 39, p. 491), как раз этому вопросу посвященная. Прим. при корректуре.

Посмотрим теперь, какие решения допускает основное уравнение.

Полагая

$$U = e^{i2\pi\Phi}; \quad \Phi = \sum a_i x^i \quad (\text{при } i=1, \dots, 5)$$

и считая a_i постоянными, найдем, что U будет решением [5'] при условии, что

$$[6] \quad a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 - a_4^2 + a_5^2 = 0.$$

Каждая система значений a_i , удовлетворяющих этому условию, даст возможное решение:

$$[7] \quad U = e^{i2\pi a_5 x^5} \cdot e^{i2\pi a_4 x^4} \cdot e^{i2\pi(a_1 x^1 + a_2 x^2 + a_3 x^3)}.$$

Введем новые обозначения, полагая

$$a_i = -\frac{\nu}{c} \cdot \dot{y}_i,$$

при чем c означает скорость света:

$$\frac{a_i}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}} = \dot{y}_i,$$

при чем заметим, что \dot{y}_i будет единичным вектором в трехмерном пространстве,

$$a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = a_4^2 - a_5^2 = -\frac{a_4^2 c^2 \left(1 - \frac{a_5^2}{a_4^2}\right)}{c^2} = \frac{\nu^2}{V^2}$$

или

$$\frac{1}{c} \sqrt{1 - \frac{a_5^2}{a_4^2}} = \frac{1}{V}.$$

В этих обозначениях [7] перейдет в

$$[7'] \quad U = e^{i2\pi a_5 x^5} \cdot e^{-i2\pi\nu \left(t - \frac{(\dot{y}r)}{V}\right)},$$

где r радиус вектор с компонентами x^1, x^2, x^3 .

Найденное нами решение имеет при $x^5 = \text{постоянная}$ вид волны, распространяющейся в трехмерном пространстве со скоростью V и с частотой ν . Если нам заданы a_i , удовлетворяющие условию [6], то из них можно определить значения ν, V и \dot{y}_i , т.-е. определить частоту, скорость и направление волны в трехмерном пространстве. Обратное, если нам произвольно заданы ν, V и \dot{y}_i в трехмерном про-

странстве, то можно вычислить соответствующие им a_i . В самом деле, мы имеем

$$[8] \quad \left\{ \begin{array}{l} a_1 = \frac{\ddot{y}_i v}{V} \\ a_2 = -\frac{v}{c}, \\ a_3 = \frac{v}{c} \sqrt{1 - \frac{c^2}{V^2}}, \end{array} \right. \quad (\text{при } i=1, 2, 3)$$

при чем соотношение [6] удовлетворено.

Напомним теперь основные представления де-Броули.

Пусть имеем частицу, покоящаяся масса которой m_0 и покоящаяся энергия $m_0 c^2$. Пусть ее скорость по отношению к системе координат K в трехмерном пространстве будет v .

Рассмотрим координатную систему \bar{K} , в которой частица покоится. Координаты в ней обозначим через $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \bar{x}^3, \bar{x}^4 = c\bar{t}$. *Предположим*, что в этой координатной системе имеется *стоячая* волна

$$\psi = e^{-i2\pi \frac{m_0 c^2}{h} \bar{t}},$$

где h постоянная Планка. Частота стоячей волны будет ν_0 :

$$\nu_0 = \frac{m_0 c^2}{h},$$

т.-е. частота предположенной волны удовлетворяет в \bar{K} известному соотношению Эйнштейна.

Перейдем от системы \bar{K} к системе K . Пусть скорость v направлена по

$$x^1 \text{ - оси, т.-е. } v^2 = v^3 = 0.$$

На основании преобразований Лоренца имеем

$$c\bar{t} = \frac{1}{\alpha} (ct - \beta x),$$

где, как обычно,

$$\beta = \frac{v}{c} \text{ и } \alpha = \sqrt{1 - \beta^2}.$$

Отсюда следует для ψ в системе K :

$$\psi = e^{-i2\pi \frac{m_0 c^2}{h} \frac{1}{\alpha} \left(t - \frac{\beta x}{c} \right)}.$$

Если направление скорости не совпадает с x^1 -осью, то вместо этого выражения мы получим

$$\psi = e^{-i2\pi \frac{m_0 c^2}{h} \cdot \frac{1}{x} \left[t - \frac{\beta}{c} (\dot{\mathbf{u}}\mathbf{r}) \right]},$$

где $\dot{\mathbf{u}}$ единичный вектор, имеющий направление скорости, а \mathbf{r} радиус вектор с компонентами x^1, x^2, x^3 ; заметим, что

$$\frac{m_0 c^2}{x} \text{ и } \frac{m_0 c \beta}{x}$$

представляют собой энергию и количество движения двигающейся частицы в системе K . Обозначим их соответственно через W и G .

Мы видим, что частота ν волны ψ в системе K равна

$$\nu = \frac{m_0 c^2}{x h} = \frac{W}{h},$$

а скорость ее определена через количество движения G соотношением

$$\frac{\nu}{V} = \frac{m c \beta}{x} = \frac{G}{h};$$

кроме того, легко видеть, что $V = \frac{c}{\beta}$. Если мы пожелаем перейти теперь от волны ψ к волне U пятимерного пространства, то значения для a_i этой волны получим из формул [8]:

$$[9] \quad \left\{ \begin{array}{l} a_i = \frac{G_i}{h}, \\ a_4 = -\frac{W}{ch} = -\frac{\nu}{c}, \\ a_5 = \frac{W}{ch} \sqrt{1 - \frac{c^2 G^2}{W^2}} = \frac{m_0 c^2}{c \cdot h} = \frac{\nu_0}{c}, \end{array} \right. \quad (i=1, 2, 3)$$

и волна U будет

$$U = e^{i2\pi \frac{\nu_0}{c} x^5} \cdot e^{-i2\pi \frac{\nu}{c} \left(ct - \frac{(\dot{\mathbf{u}}\mathbf{r})}{V} \right)}.$$

Таким образом, с помощью формулы [9] мы можем перейти от волн де-Броули ψ к волнам пятимерного пространства U и наоборот.

Легко видеть, что волна в пространстве (x^1, x^2, x^3, x^5) распространяется со скоростью света. Для упрощения дальнейших рассуждений положим, что вектор $\dot{\mathbf{u}}$ совпадает с x^1 -осью, тогда

$$v^2 = v^3 = 0; \quad a_2 = a_3 = 0,$$

и волна U будет

$$U = e^{i2\pi(a_1x^1 + a_5x^5 - a_4x^4)},$$

при чем

$$[10] \quad a_5^2 + a_1^2 = a_4^2.$$

Направление волны в пространстве (a_1a_5) будет определено отношениями:

$$\frac{a_1}{\sqrt{a_1^2 + a_5^2}} = \frac{a_1}{a_4} \quad \text{и} \quad \frac{a_5}{\sqrt{a_1^2 + a_5^2}} = \frac{a_5}{a_4},$$

а, следовательно, скорость поэтому направлена будет

$$\frac{ca_4}{\sqrt{a_1^2 + a_5^2}} = c,$$

т.е. равна скорости света.

Частота ее будет ν .

В плоскости $x^5 = 0$ скорость распространения будет

$$V = \frac{c}{\beta} = \frac{a_4}{a_1}.$$

Волны бегут, следовательно, в данном случае со скоростью большею, чем скорость света. Де-Брольи рассматривает группу волн ψ , для которых β от волны к волне слегка меняется. Скорость такой группы, как показывает де-Брольи, будет $\beta c = v$, т.е. равна скорости движения частицы.

Рассмотрим такую группу с точки зрения пятимерного пространства. Волна определяется значениями a_1, a_4, a_5 ; оставим a_5 , как зависящую только от m_0, h и c , без изменения и предположим, что мы имеем группу волн, для которых a_1 и a_4 лежат в пределах

$$\text{для } a_1 \text{ между } a_1 \text{ и } a_1 + \Delta a_1$$

$$\text{для } a_4 \text{ между } a_4 \text{ и } a_4 + \Delta a_4,$$

при чем Δa_1 и Δa_4 малые величины, квадратами которых можно пренебречь; из [10] следует, что

$$[11] \quad a_1 \Delta a_1 = a_4 \Delta a_4 (*),$$

*) Это соотношение соответствует закону дисперсии фазовых волн де-Брольи. Если n фиктивный показатель преломления пространства, то, по де-Брольи, законом дисперсии его будет:

$$n^2 = \frac{c^2}{v^2} = 1 - \frac{v_0^2}{v^2 - v_0^2},$$

как это следует из указанных выше значений для v и v_0 . Соотношение [11] с этим законом совпадает.

Какая-нибудь одна из волн, входящих в эту группу, будет иметь для a_1 и a_4 значения

$$a_1 + \xi \Delta a_1 \text{ и } a_4 + \xi \Delta a_4,$$

при чем $0 < \xi < 1$.

Фаза этой волны в сечении $x^3 = 0$ будет

$$(a_1 + \xi \Delta a_1) x^1 - (a_4 + \xi \Delta a_4) x^4 = a_1 x^1 - a_4 x^4 + \xi (\Delta a_1 x^1 - \Delta a_4 x^4) = 0.$$

В какой-нибудь произвольно взятой точке x^1, x^4 фазы различных волн группы имеют разные значения, так как значения ξ для разных волн не одинаковы. Только в точках плоскости x^1, x^4 , удовлетворяющих условию

$$[12] \quad \Delta a_1 x^1 - \Delta a_4 x^4 = 0,$$

коэффициент при ξ равен нулю, и фаза для всех волн группы одинакова (*) и равна $a_1 x^1 - a_4 x^4$.

Вследствие равенства фаз вдоль мировой линии, точки которой удовлетворяют условию [12], амплитуда результирующей волны будет здесь наибольшая.

Из [11] и [12] следует, что уравнением этой линии будет

$$a_4 x^1 - a_1 x^4 = 0,$$

откуда, в свою очередь, следует, что максимальная амплитуда или горб группы волн распространяется со скоростью

$$V^1 = \frac{ca^1}{a_4} = c \cdot \beta = v,$$

равной скорости движения частицы и меньшей скорости света c , в отличие от скорости отдельных волн группы

$$V = \frac{ca_4}{a_1} = \frac{c}{\beta} > c.$$

Фазовые волны и их групповую скорость можно весьма просто изобразить на чертеже.

Пусть горизонтальная ось в плоскости чертежа изображает пространственную x_1 -ось; пусть другая горизонтальная ось, перпендикулярная к ней и к чертежу, изображает пятую координату x_5 ; наконец, пусть вертикальная ось $x_4 = ct$ дает время. Геометрия, которой мы пользуемся, не евклидова, ее мероопределение, как в специальном принципе относительности:

$$ds^2 = dx_1^2 + dx_5^2 - dx_4^2.$$

(*) С точностью до величин второго порядка малости.

Ко- и контравариантные компоненты совпадают, и мы можем писать значки впису. Мы получим положение полевых геодезических линий, проходящих через начало координат θ , в пятимерном пространстве (на чертеже две пространственные координаты отсутствуют), если построим конус OLM с вершиной в θ с осью параллельной x_4 и с углом при вершине в 90° . Пусть одна из образующих конуса будет OL . По Фоку и Клейну, в четырехмерном пространстве, в данном случае в плоскости (x_1, x_4) чертежа, движение заряженной частицы

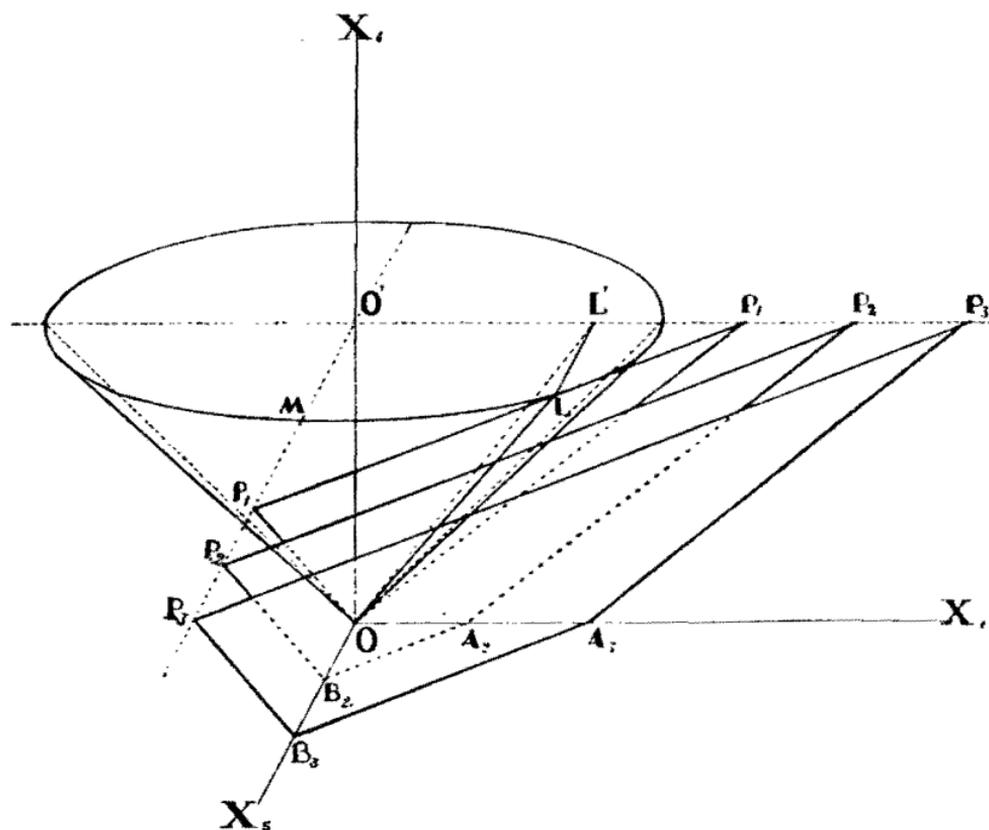


Рис. 1.

определяется положением мировой линии OL' , т.е. проекцией, соответствующей образующей OL на плоскость (x_1, x_4) .

Фазовые волны, т.е. гиперплоскости одинаковой фазы, будут в пятимерном пространстве даны уравнением

$$[13] \quad a_5 x_5 + a_1 x_1 - a_4 x_4 = \text{постоянной} = C.$$

Так как a_1 , a_4 и a_5 удовлетворяют соотношению

$$[10'] \quad a_5^2 + a_1^2 - a_4^2 = 0,$$

то отрезок, один конец которого лежит в 0, а другой в точке a_4 , a_1 , a_3 , лежит в гиперплоскости

$$[13'] \quad a_3 x_3 + a_1 x_1 - a_4 x_4 = 0;$$

с другой стороны, тот же отрезок, в силу того же соотношения (10'), лежит на конусе OLM . Мы видим, что фазовая гиперплоскость (13'), касается конуса вдоль одной из его образующих. На чертеже изображены фазовые гиперплоскости OP_1P_1 , $OA_2B_2P_2P_2$, $OA_3B_3P_3P_3$, соответствующие разным значениям постоянной C в (13). Гиперплоскость OP_1P_1 касается конуса по образующей OL . Если значения постоянной C представляют собой ряд целых чисел 0, 1, 2, 3, ..., то отрезки, отсекаемые этими плоскостями по оси $x_1 =$, т.-е.

$$OA_2 = A_2A_3 = \dots = \frac{1}{a_1},$$

изображают длину волны в трехмерном пространстве; отрезки, равные $\frac{1}{a_4}$ и отсекаемые по $x_4 =$ оси, — периоды колебания (на чертеже не изображены); отрезки отсекаемые по $x_3 =$ оси OB_2 , B_2B_3 , ... равны $\frac{1}{a_3} = \frac{h}{m_0 c^2}$. Мы считаем h , m_0 с универсальными постоянными, поэтому отрезки OB_2 , B_2B_3 , ... имеют одинаковую длину для всех фазовых волн, которые мы рассматриваем.

Из чертежа видно:

1) что скоростью V распространения фазовых волн в трехмерном пространстве, в данном случае по $x_1 =$ оси, будет наклон прямых OP_1 , A_2P_2 , ... к оси X_4 .

$$V = \frac{1}{a_1} : \frac{1}{a_4} = \frac{a_4}{a_1} > 1;$$

2) что движение группы волн де-Брольи определяется ортогональной проекцией OL на плоскость $(x_1 x_4)$, т.-е. мировой линией OL' . В самом деле, мы получим группу де-Брольи, если в узких пределах будем менять значения a_1 и a_4 . Этому в пятимерном пространстве соответствуют фазовые гиперплоскости, соприкасающиеся с конусом по образующим, весьма близким к OL . Все они пересекаются приблизительно по OL . В плоскости $(x_1 x_4)$ в каждой точке имеем для различных фазовых гиперплоскостей различные значения фазы $1 a_1 x_1 - a_4 x_4$; только на проекции OL , т.-е. на OL' , значения их будут одинаковы. Значит, проекция OL' должна определить движение группы.

Уравнением OL будет:

$$\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_4}{a_4} = \frac{x_5}{a_5},$$

а уравнением ее проекции OL' :

$$a_4 x_1 - a_1 x_4 = 0.$$

Наклон OL' , т.е. скорость группы, будет

$$V' = \frac{a_1}{a_4} = \frac{1}{V} < 1;$$

это же V' будет, как мы видели, и скоростью движения заряженной частицы, двигающейся прямолинейно и равномерно в обычном трехмерном пространстве, при отсутствии гравитационных и электромагнитных сил.

5. В заключение нам кажется небезынтересным привести одну цитату из работы знаменитого германского математика Феликса Клейна. Эта работа называется: «О новых английских работах по механике»; она напечатана тридцать пять лет тому назад и касается исследований Гамильтона и других об аналогиях между оптикой и механикой (*). Феликс Клейн говорит: «Гамильтон встретился здесь с представлением эмиссионной теории, по которой нахождение пути светового луча, проходящего через неоднородную, но изотропную среду, оказывается специальным случаем задачи о движении материальной точки; мы можем сейчас же к этому добавить, что ограничение имеющимся здесь специальным случаем несущественно, и что каждая механическая задача с помощью пространства высшего порядка может быть сведена к определению пути светового луча в соответствующей среде». (Курс. наш.)

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И ЯВЛЕНИЕ КОМПТОНА

Б. Н. ФИШКЕЛЬШТЕЙН

Квантовая механика в той форме, которая была ей придана Гейзенбергом, Борном и Иорданом (*), ограничивается, как известно, рассмотрением только *либрационных* «движений».

Борну и Винеру (**) и — независимо от них — Дираку (***) удалось найти метод, позволяющий распространить принципы квантовой механики на случай произвольных — в том числе и не периодических — «движений».

Дирак с помощью своего алгоритма, в практическом отношении представляющего значительные преимущества по сравнению с операционным исчислением Борна и Винера, исследовал с точки зрения квантовой механики на ряду с некоторыми весьма важными и интересными вопросами также и явление Комптона (*Compton Effect*).

Изложение теории этого явления, предложенной Дираком, и составляет предмет настоящей статьи.

Для расширения области применений квантовой механики в указанном направлении представляется необходимым отказаться от чрезмерной специализации природы тех переменных, которые служат для описания поведения атомных систем. Вместо того, чтобы каждой такой переменной («координате», «импульсу» или функции от этих

(*) M. Born und P. Jordan. Ztschr. f. Phys. 34, 858, 1925;

M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan. Ztschr. f. Phys. 35, 557, 1926;

M. Born. Probleme der Atomdynamik. Verlag von J. Springer. Berlin. 1926.

(**) M. Born und N. Wiener. Ztschr. f. Phys. 36, 174, 1926.

(***) P. A. M. Dirac. Proc. Royal Soc. London (A), 110, 561, 1926; 111, 281, 405, 1926.

величин) сопоставлять определенным образом построенную совокупность чисел (двухмерную бесконечную матрицу), предположим — вместе с Дираком, — что переменные квантовой механики суть особые величины, которые мы назовем квантовыми величинами (*) и которые обладают всеми свойствами обыкновенных алгебраических чисел за исключением свойства коммутативности при умножении. Таким образом, произвольные квантовые величины x, y, z удовлетворяют соотношениям (**):

$$[1] \quad \left\{ \begin{array}{l} x + y = y + x, \\ (x + y) + z = x + (y + z), \\ (xy)z = x(yz), \\ x(y + z) = xy + xz, \\ (x + y)z = xz + yz, \\ xy \neq yx. \end{array} \right.$$

Далее, если q_k и p_l ($k, l = 1, 2, \dots, f$) суть канонические переменные системы с f степенями свободы, то для них имеют место соотношения (Vertauschungsregeln):

$$[2] \quad \left\{ \begin{array}{l} q_k q_l - q_l q_k = 0, \\ p_k p_l - p_l p_k = 0, \\ p_k q_l - q_l p_k = \frac{h}{2\pi i} \delta_{kl}, \end{array} \right.$$

где $\delta_{kl} = \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ если } k = l \\ 0, \text{ » } k \neq l \end{array} \right\}$ ($h = 6,54 \cdot 10^{-27}$ erg. sec. — универсальная постоянная Планка; $i = \sqrt{-1}$); формулы [2] заменяют свойство коммутативности сомножителей и вместе с тем могут быть приняты за новую формулировку квантовых условий.

Функции от квантовых величин определяются с помощью действий умножения и сложения, произведенных над аргументом. Функцию от

(*) Удобнее всего было бы назвать их квантовыми числами, но последний термин, как известно, служит для обозначения величин, определяющих стационарные состояния атома.

(**) Заметим, что к указанным свойствам квантовых величин Дирак присоединяет еще одно, с помощью которого он, между прочим, доказывает однозначность определения величины $\frac{1}{x}$ по заданному x . Дирак предполагает, что если произведение двух квантовых величин обращается в нуль, то один из сомножителей наверное равен нулю. Это требование не выполняется, например, для матриц, являющихся частным видом квантовых величин. Ср. M. Born und P. Jordan, loc. cit., p. 861, далее L. Brillouin, Journ. de Phys. (6), 7, 135, 1926.

квантовых величин будем называть вещественной, если она обладает свойством инвариантности по отношению к замене i на $-i$ и одновременной перестановке порядка всех сомножителей. Относительно дифференцирования заметим, что оно выполняется по обычным правилам при условии сохранения порядка всех сомножителей. Так, например, если $f(z) = z^n$, где n есть обыкновенное число, то $\frac{\partial f}{\partial z} = nz^{n-1}$.

Назовем скобками Пуассона от двух чисел x и y величину $[x, y]$, определяемую соотношением

$$[3] \quad yx - xy = \frac{h}{2\pi i} [x, y].$$

Непосредственным вычислением легко показать, что скобки Пуассона от квантовых величин обладают следующими свойствами:

$$[4] \quad \left\{ \begin{array}{l} [x_1 + x_2, y] = [x_1, y] + [x_2, y], \\ [x_1 x_2, y] = x_1 [x_2, y] + [x_1, y] x_2, \\ [x, y_1 y_2] = y_1 [x, y_2] + [x, y_1] y_2, \\ [x, y] = -[y, x], \\ [[x, y], z] + [[y, z], x] + [[z, x], y] = 0. \end{array} \right.$$

Таким образом, на основании [2] имеем:

$$[2'] \quad [q_k, q_l] = 0; [p_k, p_l] = 0; [q_k, p_l] = \delta_{kl}.$$

С помощью формул [4] весьма сильно упрощаются многие тождественные преобразования. В качестве примера вычислим разность $p^2 q^2 - q^2 p^2$.

По определению скобок Пуассона имеем:

$$p^2 q^2 - q^2 p^2 = \frac{h}{2\pi i} [q^2, p^2].$$

Далее,

$$\begin{aligned} [q^2, p^2] &= q[q, p^2] + [q, p^2]q, \\ [q, p^2] &= p[q, p] + [q, p]p = 2p, \\ [q^2, p^2] &= 2(qp + pq). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$p^2 q^2 - q^2 p^2 = \frac{h}{\pi i} (qp + pq).$$

В тех случаях, когда дифференцирование функций не приводит ни к каким недоразумениям, связанным с порядком сомножителей,

оказывается возможным воспользоваться классическим выражением для скобок Пуассона от двух функций f и φ

$$[5] \quad [f, \varphi] = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial \varphi}{\partial p_k} - \frac{\partial \varphi}{\partial q_k} \frac{\partial f}{\partial p_k} \right).$$

Так, например,

$$[6] \quad \begin{cases} [f(q), p] = \frac{\partial f}{\partial q}, \\ [f(p), q] = \frac{\partial f}{\partial p}, \end{cases}$$

откуда

$$[6'] \quad \begin{cases} f(p)q - qf(p) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial f}{\partial p}, \\ pf(q) - f(q)p = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial f}{\partial q}. \end{cases}$$

Положив $f = e^{i(\tau q)}$, где $(\tau q) = \tau_1 q_1 + \tau_2 q_2 + \dots + \tau_l q_l$, получим

$$[7] \quad \begin{aligned} [e^{i(\tau q)}, p_k] &= i\tau_k e^{i(\tau q)}, \\ p_k e^{i(\tau q)} - e^{i(\tau q)} p_k &= \frac{h}{2\pi} \tau_k e^{i(\tau q)}. \end{aligned}$$

или

$$[8] \quad e^{i(\tau q)} p_k = \left(p_k - \tau_k \frac{h}{2\pi} \right) e^{i(\tau q)}.$$

Применяя метод полной индукции, легко показать, что если $f(p_k, q_k)$ есть произвольная функция от всех p и q , то

$$[9] \quad \begin{cases} e^{i(\tau q)} f(p_k, q_k) = f\left(q_k, p_k - \tau_k \frac{h}{2\pi}\right) e^{i(\tau q)}, \\ f(p_k, q_k) e^{i(\tau q)} = e^{i(\tau q)} f\left(q_k, p_k + \tau_k \frac{h}{2\pi}\right). \end{cases}$$

Далее, в классической механике производная по времени от произвольной функции координат и моментов имеет следующий вид:

$$\frac{df}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k} \dot{p}_k \right),$$

откуда, приняв во внимание уравнения движения в канонической форме, получим

$$[10] \quad \frac{df}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial f}{\partial p_k} \right) = [f, H],$$

где H есть гамильтонова функция рассматриваемой системы.

Последнюю формулу мы перенесем в квантовую механику и примем ее за определение производной по времени от функции канонических переменных, не зависящей явным образом от времени.

Решение задачи квантовой механики—по аналогии с классической (*)—заключается в разыскании совокупности униформизирующих переменных J_k, w_k , обладающих следующими свойствами:

1-е свойство:

$$[J_k, J_l] = 0; [w_k, w_l] = 0; [w_k, J_l] = \delta_{kl}; \quad (k, l = 1, 2, \dots, f).$$

2-е свойство:

После преобразования к новым переменным гамильтонова функция H зависит только от одних J .

3-е свойство:

Первоначальные канонические переменные p и q могут быть представлены рядом Фурье следующего вида:

$$[11] \quad \sum_{\tau} C_{\tau} e^{i(\tau w)} = \sum_{\tau} e^{i(\tau w)} C'_{\tau},$$

$$(\tau w) = \tau_1 w_1 + \tau_2 w_2 + \dots + \tau_f w_f,$$

τ_k суть обыкновенные целые числа; коэффициенты C_{τ} и C'_{τ} зависят только от J .

Если такая совокупность униформизирующих переменных существует, то система носит название условно-периодической.

В качестве примера рассмотрим так называемое преобразование Пуанкаре. В классической механике (**) это преобразование вводится с помощью соотношений

$$q = \sqrt{2J} \sin w$$

$$p = \sqrt{2J} \cos w,$$

которые эквивалентны следующим:

$$e^{iw} = \sqrt{\frac{p + iq}{p - iq}}$$

$$J = \frac{1}{2}(p^2 + q^2).$$

[*]

(*) M. Born, Vorlesungen über Atommechanik, B. 1, p. 29.

(**) M. Born, loc. cit., p. 38.

Приняв во внимание (6), получим

$$[**] \quad [J, p] = \frac{\partial J}{\partial q} = q;$$

$$[J, q] = -\frac{\partial J}{\partial p} = -p.$$

В квантовой механике (*) угловая переменная w вводится с помощью соотношения

$$e^{iw}(p - iq)e^{iw} = p + iq.$$

Легко видеть, что последняя формула удовлетворяет приведенному выше условию вещественности. Для определения переменной J , канонически сопряженной с угловой переменной w , мы будем пользоваться формулами [*].

Полученные выше результаты приводят нас к заключению, что при переходе атома из состояния, характеризуемого совокупностью величин $J_k = n_k \frac{h}{2\pi}$ в состояние, определяемое числами $J_k = (n_k - \tau_k) \frac{h}{2\pi}$, интенсивность испускаемого излучения (выраженная, конечно, обыкновенным числом) определяется коэффициентом $C_\tau(J_1, \dots, J_f)$, стоящим слева от $e^{i(\tau w)}$ в разложении в ряд Фурье полного электрического момента атома (**) при частных значениях $J_k = n_k \frac{h}{2\pi}$. Тот же самый результат получится, если в коэффициент, стоящий справа от $e^{i(\tau w)}$, подставить $J_k = (n_k - \tau_k) \frac{h}{2\pi}$.

Вычислим далее производную по времени от $e^{i(\tau w)}$. Приняв во внимание (9) и (10), получим следующее:

$$\frac{d}{dt} e^{i(\tau w)} = [e^{i(\tau w)}, H] = \frac{2\pi i}{h} \{ H e^{i(\tau w)} - e^{i(\tau w)} H \},$$

$$e^{i(\tau w)} H(J_1, \dots, J_f) = H\left(J_1 - \tau_1 \frac{h}{2\pi}, \dots, J_f - \tau_f \frac{h}{2\pi}\right) e^{i(\tau w)},$$

$$H(J_1, \dots, J_f) e^{i(\tau w)} = e^{i(\tau w)} H\left(J_1 + \tau_1 \frac{h}{2\pi}, \dots, J_f + \tau_f \frac{h}{2\pi}\right),$$

$$[12] \quad \frac{d}{dt} e^{i(\tau w)} = 2\pi i(\tau w) e^{i(\tau w)} = 2\pi i e^{i(\tau w)} (\tau w)',$$

(*) F. London. Ztschr. f. Phys. 37, 915, 1926; P. A. M. Dirac. Proc. Royal Soc. London. (A), 111, 281, 1926.

(**) M. Born, loc. cit., p. 115.

где

$$[13] \quad (\nu)h = H(J_1, \dots, J_f) - H\left(J_1 - \tau_1 \frac{h}{2\pi}, \dots, J_f - \tau_f \frac{h}{2\pi}\right)$$

$$[13'] \quad (\nu)'h = H\left(J_1 + \tau_1 \frac{h}{2\pi}, \dots, J_f + \tau_f \frac{h}{2\pi}\right) - H(J_1, \dots, J_f).$$

Величины (ν) и $(\nu)'$ могут быть названы частотами излучения, испускаемого атомом при переходе из одного стационарного состояния в другое. Другими словами, эти величины являются такими же функциями от J квантовых величин, как в теории Бора наблюдаемые частоты — от соответствующих J обыкновенных чисел. Следует заметить, что из формул [13] и [13'], выражающих условие частоты Бора, непосредственно вытекает комбинационный принцип Ритца.

Познакомившись с общими основаниями варианта квантовой механики, принадлежащего Дираку, перейдем к интересующему нас вопросу о рассеянии света свободными электронами.

Будем рассматривать свободный электрон, на который падает плоская поляризованная волна монохроматического излучения частоты ν . Вычисление частоты и интенсивности рассеянного излучения сводится — с точки зрения квантовой механики — к вычислению «спектра испускания» системы, состоящей из электрона и падающей на него волны. Такая постановка вопроса является отказом от представления о корпускулярной природе света, лежащего в основе теорий Дебая (P. Debye) и Комптона и, до известной степени, сближает рассматриваемую здесь теорию с классическими (или, вернее, полуклассическими) теориями Я. И. Френкеля, Гальперна (O. Halpern) и др.

Пространственно-временное положение электрона будем характеризовать четырьмя координатами $x_k (k = 1, 2, 3, 4)$, из коих x_1, x_2, x_3 суть декартовы координаты, определяющие положение электрона в пространстве, $x_4 = ict$. В качестве импульса, сопряженного последней координате, введем величину $p_4 = \frac{iW}{c}$, где W обозначает полную энергию системы. Действительно, имея в виду полную равноправность «временной» координаты с пространственными, получим

$$[x_k, p_k] = 1, \quad (k = 1, 2, 3, 4)$$

откуда

$$\left[ict, \frac{iW}{c} \right] = 1$$

или

$$[t, W] = -1.$$

Таким образом, в релятивистской квантовой механике, также как и в классической (*) динамике, время t и полная энергия системы W , взятая с обратным знаком, являются канонически сопряженными переменными.

Предположим далее, что падающее излучение распространяется в положительном направлении оси x_1 и что электрический вектор волны направлен вдоль оси x_2 . Для составляющих четырехмерного вектора (Vierervektor), с помощью которого описывается электромагнитное поле волны, получим

$$[14] \quad \mu_1 = \mu_3 = \mu_4 = 0; \quad \mu_2 = a \cos \tilde{\nu}(ct - x_1),$$

где $\nu = 2\pi \frac{\nu}{c} = 2\pi \frac{1}{\lambda}$; при этом величина a связана с интенсивностью падающего излучения I_0 формулой

$$[15] \quad J_0 = \frac{ca^2\nu^2}{8\pi}$$

(a , ν , J_0 — обыкновенные числа).

Мы предполагаем, что a малая величина, и в дальнейшем будем пренебрегать членами, содержащими a^2 .

Приняв во внимание, что в рассматриваемом случае импульсы выражаются формулой (**)

$$[16] \quad p_k = m \frac{dx_k}{d\sigma} - \frac{\varepsilon}{c} \mu_k$$

(m — масса покоящегося электрона; ε — заряд электрона; σ — собственное время), мы придем к следующему уравнению Гамильтона:

$$[17] \quad m^2 c^2 = \frac{W^2}{c^2} - p_1^2 - \left\{ p_2 + \frac{\varepsilon a}{c} \cos \tilde{\nu}(ct - x_1) \right\}^2 - p_3^2.$$

Обратимся теперь к вычислению частоты ν^* и интенсивности излучения, испускаемого нашей системой в направлении, образующем с осями координат углы, косинусы коих равны соответственно λ_1 , λ_2 , λ_3 (обыкновенные числа).

(*) Термин «классический» мы применяем здесь, противопоставляя ему термин «квантовый». Ср. A. Sme k a l. Encykl. d. Math. Wiss. V, 28, p. 866.

(**) W. Wils o n. Proc. Royal Soc. London (A), 102, 478, 1923.

Введем следующее каноническое преобразование:

$$[18] \quad \left\{ \begin{array}{l} x_1' = ct - x_1, \\ x_2' = x_2, \\ x_3' = x_3, \\ t' = t - \frac{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \lambda_3 x_3}{c}, \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} p_1 = -p_1' + \lambda_1 \frac{W'}{c}, \\ p_2 = p_2' + \lambda_2 \frac{W'}{c}, \\ p_3 = p_3' + \lambda_3 \frac{W'}{c}, \\ -W = -W' + cp_1', \end{array} \right.$$

откуда

$$[19] \quad \left\{ \begin{array}{l} (1 - \lambda_1) p_1' = -p_1 + \lambda_1 \frac{W}{c} \\ (1 - \lambda_1) p_2' = \lambda_2 p_1 + (1 - \lambda_1) p_2 - \lambda_2 \frac{W}{c} \\ (1 - \lambda_1) p_3' = \lambda_3 p_1 + (1 - \lambda_1) p_3 - \lambda_3 \frac{W}{c} \\ (1 - \lambda_1) W' = W - cp_1 \end{array} \right.$$

Подставив в [17] и пренебрегая членами, содержащими a^2 , получим

$$[20] \quad m^2 c^2 = -\frac{2W'}{c} \cdot A - B,$$

где

$$\begin{aligned} A &= (1 - \lambda_1) p_1' + \lambda_2 p_2' + \lambda_3 p_3' + \lambda_2 \frac{\varepsilon a}{c} \cos \tilde{\nu} x_1' = \\ &= \lambda_1 p_1 + \lambda_2 \left(p_2 + \frac{\varepsilon a}{c} \cos \tilde{\nu} x_1' \right) + \lambda_3 p_3 \\ B &= p_2'^2 + p_3'^2 + \frac{2\varepsilon a}{c} p_2' \cos \tilde{\nu} x_1'. \end{aligned}$$

Положив

$$[21] \quad H = -\frac{1}{2} c(m^2 c^2 + B) A^{-1},$$

приведем уравнение [21] к стандартному виду

$$[22] \quad H - W' = 0.$$

Легко показать, что уравнение [20] эквивалентно следующему уравнению более общего вида

$$H = -\frac{1}{2} c \varphi_1 (m^2 c^2 + B) \varphi_2,$$

где φ_1 и φ_2 , являясь функциями от одной переменной A , удовлетворяют условию $\varphi_1\varphi_2 = A^{-1}$

Заметим, что

$$[p_2', H] = 0, \quad [p_3', H] = 0$$

и, следовательно, $p_2' = \beta_2$, $p_3' = \beta_3$, где β_2 и β_3 — постоянные.

Введем угловую переменную w , определяемую соотношением

$$[23] \quad w = \tilde{\nu}x_1' + \frac{2 \varepsilon a p_2' \sin \tilde{\nu}x_1'}{c m^2 c^2 + B_0}$$

где $B_0 = p_2'^2 + p_3'^2$.

Далее, положим

$$[24] \quad J = \frac{1}{\sqrt{(1 - \lambda_1)}} \left\{ (1 - \lambda_1) p_1' + \right. \\ \left. + \lambda_2 \left(p_2' + \frac{\varepsilon a}{c} \cos \tilde{\nu}x_1' \right) \left\{ \frac{m^2 c^2 + p_2'^2 + p_3'^2}{m^2 c^2 + p_3'^2 + p_3'^2 + \frac{2 \varepsilon a}{c} p_2' \cos \tilde{\nu}x_1'} \right\} \right\} = \\ = \frac{1}{\tilde{\nu}(1 - \lambda_1)} A \frac{m^2 c^2 + B_0}{m^2 c^2 + B}$$

Непосредственное вычисление показывает, что w и J действительно являются канонически сопряженными координатами, т.е. что

$$[25] \quad [w, J] = 1.$$

Из [24] и [21] имеем

$$[21''] \quad H = -\frac{1}{2} c \frac{m^2 c^2 + p_2'^2 + p_3'^2}{\tilde{\nu}(1 - \lambda_1) J}$$

Далее,

$$[26] \quad [p_2', e^{iw}] = [p_3', e^{iw}] = 0,$$

откуда следует

$$[26'] \quad p_2' e^{iw} = e^{iw} p_2'; \quad p_3' e^{iw} = e^{iw} p_3'.$$

Обозначив через $\Delta p_2'$, $\Delta p_3'$ и ΔJ изменения, претерпеваемые при «квантовом переходе» обыкновенными числами, соответствующими нашим униформизирующим переменным p_2' , p_3' и J и приняв, во внимание [8], [25], [26'], получим:

$$\Delta p_2' = 0; \quad \Delta p_3' = 0; \quad \Delta J = -\frac{h}{2\pi}.$$

Условие частоты приводит к следующему результату:

$$\Delta H = -h\nu^* = \Delta W'.$$

Пренебрегая в [24] в виду малости величины a также и первыми ее степенями, получим

$$\Delta A = -\frac{h\nu}{c}(1 - \lambda_1)$$

или

$$\Delta p'_1 = -\frac{h\nu}{c}.$$

Воспользовавшись уравнениями преобразования [18], получим

$$[27] \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta p_1 = \frac{h\nu}{c} - \lambda_1 \frac{h\nu^*}{c}, \\ \Delta p_2 = -\lambda_2 \frac{h\nu^*}{c}, \\ \Delta p_3 = -\lambda_3 \frac{h\nu^*}{c}, \\ \frac{\Delta W}{c} = \frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu^*}{c}. \end{array} \right.$$

Полученные уравнения выражают условия сохранения энергии и количества движения и находятся в полном согласии с результатами теории Дебая-Комптона, давая ту же самую величину для частоты рассеянного] излучения и для скорости, приобретенной электроном после столкновения со световым квантом.

Недостаток места не позволяет нам подробно остановиться на вычислении интенсивности рассеянного излучения, как функции от угла рассеяния. Приведем здесь только окончательный результат. Интенсивность I рассеянного излучения на расстоянии r от рассеивающего электрона выражается формулой:

$$[28] \quad \mathbb{E}I = \frac{e^4 I_0}{m^2 c^4 r^2} \left(\frac{\nu^*}{\nu} \right)^3 (1 - \lambda_2^2),$$

которая от соответствующей формулы в классической теории Томсона отличается только множителем $\left(\frac{\nu^*}{\nu} \right)^3$.

Сравнение с опытом показывает, что [28] приводит к несколько лучшему согласию с экспериментальными данными, чем соответствующая формула теории Комптона.

Наконец, в заключение заметим, что совершенно тождественный результат был недавно получен Брейтом *) с помощью соображений, основанных на применении принципа соответствия.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ТЕОРИИ ШРЕДИНГЕРА

В. А. ФОК

По теории Шредингера, уровни энергии данной механической системы представляют «характеристические числа» некоторого дифференциального уравнения, связанного с этой системой, а интенсивности спектральных линий сопоставляются с интегралами, содержащими «фундаментальные функции» этого уравнения. Поэтому для понимания теории Шредингера необходимо ознакомиться с основными положениями того отдела математики, в котором рассматриваются эти понятия (*).

Настоящий очерк и имеет целью дать основные сведения по этому вопросу.

§ 1. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ И ПРЕДЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Мы начнем с рассмотрения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Рассмотрим «самосопряженное» уравнение второго порядка, содержащее параметр λ

$$[1] \quad p(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + p'(x) \frac{dy}{dx} + [q(x) + \lambda r(x)] y = 0$$

или короче

$$[1^*] \quad L(y) + \lambda r y = 0,$$

где через $L(y)$ обозначен оператор

$$[2] \quad L(y) = p(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + p'(x) \frac{dy}{dx} + q(x) y.$$

(*) См., напр., В. А. Стеклов. Основные задачи математической физики, ч. I и ч. II, Петербург, 1922 - 1923. Riemann - Webers Differentialgleichungen der Physik, Braunschweig, 1925. R. Courant und D. Hilbert. Methoden der mathematischen Physik, Berlin, 1924. Bieberbach. Differentialgleichungen, Berlin, 1926.

Самосопряженным уравнение или оператор называется в том случае, когда коэффициент при $\frac{dy}{dx}$ (т.-е. $p'(x)$) есть производная от коэффициента при $\frac{d^2y}{dx^2}$ (т.-е. от $p(x)$).

Уравнение [1] или [1*] называется однородным; уравнение же, правая часть которого не нуль, а некоторая функция $f(x)$

$$[3] \quad L(y) + \lambda p y = f(x),$$

называется неоднородным.

В уравнении [1] мы будем предполагать функции $p(x)$, $q(x)$ и $r(x)$ непрерывными и имеющими непрерывные две производные; кроме того, мы будем считать, что $p(x)$ и $r(x)$ положительны и в рассматриваемом промежутке значений x

$$[4] \quad a \leq x \leq b$$

не обращаются в нуль

$$[5] \quad p(x) > 0 \quad r(x) > 0.$$

Тогда все точки промежутка (a, b) будут обыкновенными точками уравнения. Заметим, что точка $x = x_0$ называется «несущественно особенной» или просто «особенной», если при $x = x_0$ функция $\frac{p'(x)}{p(x)}$ имеет полюс не выше первого порядка, а функции $\frac{q(x)}{p(x)}$ и $\frac{r(x)}{p(x)}$ полюс не выше второго порядка. Если же эти величины обращаются при $x = x_0$ в бесконечность более высокого порядка, то эта точка называется «существенно особенной» точкой уравнения.

В теории Шредингера встречаются почти исключительно такие уравнения, для которых концы промежутка суть особенные точки; кроме того, промежутки чаще всего бывают бесконечными. Основные понятия, которые будут нами рассмотрены, сохранят смысл и в этих случаях; но применение полученных результатов потребует каждый раз особого исследования.

Простейшая задача, которая представляется в связи с уравнением [1], есть так называемая задача Коши. Она состоит в том, что требуется найти интеграл уравнения [1] по заданным в одной точке промежутка значениям самой функции и ее производной

$$[6] \quad y = y_0; \quad \frac{dy}{dx} = y_0'.$$

Здесь же нам придется иметь дело с задачами другого рода: предельные условия будут относиться к *обоим* концам промежутка. Общий вид таких предельных условий есть

$$[7] \quad \begin{cases} \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) + \alpha_3 y(b) + \alpha_4 y'(b) = A \\ \beta_1 y(a) + \beta_2 y'(a) + \beta_3 y(b) + \beta_4 y'(b) = B \end{cases}$$

Когда в правой части [7] постоянные A и B обе равны нулю, предельные условия называются однородными. Если как уравнение, так и предельные условия однородны, мы будем говорить об *однородной задаче*; в противном случае задача называется неоднородной.

Отметим следующие частные случаи однородных предельных условий:

$$[8] \quad y(a) = 0; \quad y(b) = 0 \quad (\text{предельные условия первого рода})$$

$$[9] \quad y'(a) = 0; \quad y'(b) = 0 \quad (\text{предельные условия второго рода})$$

$$[10] \quad y(a) - y(b) = 0; \quad y'(a) - y'(b) = 0 \quad (\text{условия периодичности}).$$

В дальнейшем мы будем рассматривать главным образом условия первого рода.

Заметим, что когда один или оба конца промежутка являются особенными точками, то одно или оба предельных условия могут быть заменены требованием, чтобы в этих точках решение или оставалось конечным, или обращалось в нуль или в бесконечность определенного порядка.

§ 2. ОДНОРОДНАЯ И НЕОДНОРОДНАЯ ЗАДАЧА

В отличие от задачи Коши, рассматриваемые здесь задачи имеют решение не всегда, а именно, вообще говоря, имеет решение либо однородная, либо неоднородная задача. Покажем это на примере предельных условий первого рода.

Рассмотрим сперва неоднородную задачу. Возьмем какие-либо два линейно-независимых интеграла

$$y_1(x, \lambda) \text{ и } y_2(x, \lambda)$$

однородного уравнения [1]. Пусть $\varphi(x)$ есть частное решение неоднородного уравнения [3]. Всякое решение этого уравнения, в том числе и удовлетворяющее условиям [8], может быть представлено в виде

$$[11] \quad y = c_1 y_1(x, \lambda) + c_2 y_2(x, \lambda) + \varphi(x).$$

Чтобы выполнялись условия [8], нужно, чтобы было

$$[12] \quad \begin{cases} c_1 y_1(a, \lambda) + c_2 y_2(a, \lambda) = -\varphi(a) \\ c_1 y_1(b, \lambda) + c_2 y_2(b, \lambda) = -\varphi(b) \end{cases}$$

Если определитель из коэффициентов при постоянных c_1 и c_2 , т.-е. величина

$$[13] \quad \Delta = y_1(a, \lambda)y_2(b, \lambda) - y_1(b, \lambda)y_2(a, \lambda)$$

не равна нулю, то из уравнений [12] можно найти эти постоянные, каковы бы ни были числа $\varphi(a)$ и $\varphi(b)$, т.-е. какова бы ни была функция $f(x)$ в правой части [3]. Если же величина Δ [13] обращается в нуль, то для возможности нахождения постоянных нужно, чтобы одно из уравнений [12] было следствием другого, что налагает особые ограничения (*) на заданную функцию $f(x)$.

Рассмотрим теперь однородную задачу. В этом случае в правых частях равенств [12] будут стоять нули, и для возможности решения необходимо, чтобы $\Delta = 0$.

Таким образом мы приходим к следующему заключению. Если имеет решение однородная задача, то неоднородная может иметь его только при известном условии, наложенном на $f(x)$. Если же однородная задача не имеет решения, то неоднородная имеет его при произвольной функции $f(x)$.

§ 3. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ЧИСЛА И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

Интегралы $y_1(x, \lambda)$ и $y_2(x, \lambda)$, а следовательно и выражение $\Delta = \Delta(\lambda)$ формулы [13] представляют целые трансцендентные функции от параметра λ . Значения параметра λ

$$[14] \quad \lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s, \dots,$$

при которых возможна однородная задача, являются таким образом корнями целой трансцендентной функции $\Delta(\lambda)$. Эти значения называются *характеристическими числами*, а соответствующие им решения однородной задачи — *фундаментальными функциями*. Напомним, что в предыдущем параграфе мы рассматривали только предельные условия первого рода; вообще же для каждого рода предельных условий существуют свои характеристические числа и свои фундаментальные функции.

В случае условий периодичности каждому характеристическому числу соответствуют две, а в остальных случаях одна фундаментальная функция.

Совокупность характеристических чисел называется их *спектром*. Заметим, что когда промежуток бесконечен, может случиться,

(*) Какие именно, мы увидим ниже, в § 7.

что однородная задача имеет решение не только когда параметр λ принимает дискретный ряд значений [14], но также и при непрерывном его изменении в некотором промежутке. В последнем случае говорят о наличии «сплошного спектра».

Для дальнейшего будет удобно положить в операторе $L(y)$ $p(x) = 1$. Это не представляет ограничения, так как после подстановки $\bar{y} = y\sqrt{p(x)}$ уравнение не будет содержать члена с первой производной.

Обозначим через

$$y_s(x) = y(x, \lambda_s)$$

фундаментальную функцию, соответствующую характеристическому числу λ_s , а через $y_r(x)$ такую же функцию для $\lambda = \lambda_r$.

Эти функции будут удовлетворять уравнениям

$$[15] \quad \begin{cases} \frac{d^2 y_s}{dx^2} + (q + \lambda_s) y_s = 0 \\ \frac{d^2 y_r}{dx^2} + (q + \lambda_r) y_r = 0 \end{cases}$$

Умножая первое из этих уравнений на y_r , второе на y_s и вычитая, получим равенство, которое можно написать в виде

$$[16] \quad \frac{d}{dx} \left[y_r \frac{dy_s}{dx} - y_s \frac{dy_r}{dx} \right] + (\lambda_s - \lambda_r) \rho y_r y_s = 0.$$

Интегрируя это выражение в пределах от a до b и замечая, что в силу однородных предельных условий разность значений выражения в квадратных скобках на пределах равна нулю, получим

$$(\lambda_r - \lambda_s) \int_a^b \rho y_r y_s dx = 0.$$

Если $r \neq s$, то равен нулю интеграл

$$[17] \quad \int_a^b \rho(x) y_r(x) y_s(x) dx = 0. \quad (r \neq s).$$

Это свойство фундаментальных функций называют свойством ортогональности. Если мы введем функции

$$[18] \quad \varphi_s(x) = \frac{y_s(x)}{\sqrt{\int_a^b \rho y_s^2 dx}},$$

то они сверх свойства ортогональности [17] будут обладать также и свойством *нормальности*, которое выражается равенством

$$[19] \quad \int_a^b \rho(x) [\varphi_s(x)]^2 dx = 1.$$

§ 4. ФУНКЦИЯ ГРИНА

Обратимся теперь к неоднородной задаче, т.-е. к уравнению

$$[20] \quad \frac{d^2 y}{dx^2} + (q + \lambda \rho) y = f(x),$$

при чем будем рассматривать предельные условия первого рода. Обозначим через $y_1(x, \lambda)$ и $y_2(x, \lambda)$ те интегралы соответствующего однородного уравнения, которые удовлетворяют условиям

$$[21] \quad \begin{cases} y_1(a, \lambda) = 0 & y_2(b, \lambda) = 0_2 \\ y_1'(a, \lambda) = 1 & y_2'(b, \lambda) = 1_2 \end{cases}$$

Тогда решение [20], удовлетворяющее условиям первого рода, может быть представлено в виде

$$[22] \quad y = \frac{1}{D} \left\{ y_1(x, \lambda) \int_b^x y_2(\xi, \lambda) f(\xi) d\xi - y_2(x, \lambda) \int_a^x y_1(\xi, \lambda) f(\xi) d\xi \right\},$$

где

$$[23] \quad D = y_1' y_2 - y_1 y_2'.$$

Если мы теперь положим

$$[24] \quad \begin{cases} G(x, \xi, \lambda) = \frac{y_1(\xi, \lambda) y_2(x, \lambda)}{D} \text{ при } \xi \leq x \\ G(x, \xi, \lambda) = \frac{y_1(x, \lambda) y_2(\xi, \lambda)}{D} \text{ при } \xi \geq x, \end{cases}$$

то формулу [22] можно переписать в виде

$$[25] \quad y = - \int_a^b G(x, \xi, \lambda) f(\xi) d\xi.$$

Введенная нами функция $G(x, \xi, \lambda)$ называется функцией Грина для данной задачи. Заметим, что для каждого рода предельных условий существует своя особая функция Грина.

Функция Грина обладает следующими свойствами:

- 1) удовлетворяет однородному уравнению,
- 2) удовлетворяет однородным предельным условиям,
- 3) непрерывна,
- 4) производная $\frac{\partial G}{\partial x}$ терпит при $x = \xi$ разрыв следующего рода

$$[26] \quad \left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)_{x=\xi+0} - \left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)_{x=\xi-0} = -1.$$

Можно показать, что функция Грина симметрична относительно переменных x и ξ .

§ 5. СВЯЗЬ С ИНТЕГРАЛЬНЫМИ УРАВНЕНИЯМИ

Между рассматриваемой нами задачей и теорией интегральных уравнений существует тесная связь.

В самом деле, перепишем уравнение [20] в виде

$$[27] \quad \frac{d^2 y}{dx^2} + qy = f_1(x),$$

где

$$[28] \quad f_1(x) = f(x) - \lambda qy.$$

По формуле [25] уравнение [27] для данных предельных условий равносильно следующему

$$y = - \int_a^b G(x, \xi, 0) f_1(\xi) d\xi$$

или

$$[29] \quad y(x) = F(x) + \lambda \int_a^b G(x, \xi, 0) p(\xi) y(\xi) d\xi,$$

где

$$[30] \quad F(x) = - \int_a^b G(x, \xi, 0) f(\xi) d\xi.$$

Уравнение [29] можно рассматривать как интегральное уравнение Фредгольма для определения $y(x)$. Решение его дается формулой [25].

Заметим, что интегральное уравнение заменяет собою как дифференциальное уравнение, так и предельные условия.

§ 6. РАЗЛОЖЕНИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА ПО ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМ ФУНКЦИЯМ

Чтобы получить разложение функции Грина по фундаментальным функциям, рассмотрим подробнее величину D формул [23] и [24].

Мы имеем

$$[31] \quad D = \begin{vmatrix} y_1'(x, \lambda) & y_2'(x, \lambda) \\ y_1(x, \lambda) & y_2(x, \lambda) \end{vmatrix}.$$

В нашем случае, когда $p(x) = 1$, «определитель Вронского» D есть величина постоянная, значение которой равно

$$[32] \quad D = y_2(a, \lambda) = -y_1(b, \lambda).$$

Когда λ не есть характеристическое число, D не равен нулю, и интегралы $y_1(x, \lambda)$ и $y_2(x, \lambda)$ линейно независимы; в противном случае они отличаются только постоянным множителем (*); } тогда равен нулю и определитель Δ формулы [13].

Рассмотрим значение D вблизи $\lambda = \lambda_s$ и докажем, что $\lambda = \lambda_s$ есть простой корень D , рассматриваемого как функция от λ .

Положим

$$[33] \quad y_1(x, \lambda) = y_1(x, \lambda_s) + (\lambda - \lambda_s)\eta(x, \lambda_s) + \dots$$

и вычислим величину $\eta(b, \lambda_s)$.

Подставив [33] в уравнение

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + (q + \lambda_s \rho)y = (\lambda_s - \lambda)\rho y$$

и приравнявая нулю коэффициент при $\lambda - \lambda_s$, получим

$$[34] \quad \eta''(x, \lambda_s) + (q + \lambda_s \rho)\eta(x, \lambda_s) = -\rho y_1(x, \lambda_s).$$

(С другой стороны,

$$[35] \quad y_1''(x, \lambda_s) + (q + \lambda_s \rho)y_1(x, \lambda_s) = 0.$$

Умножая первое из этих уравнений на $-y_1(x, \lambda_s)$, а второе на $\eta(x, \lambda_s)$ и складывая, получим

$$[36] \quad \frac{d}{dx}(y_1' \eta - y_1 \eta') = \rho [y_1(x, \lambda_s)]^2.$$

(*) А именно,

$$y_1(x, \lambda_s) = y_1'(b, \lambda_s) y_2(x, \lambda_s).$$

Интегрируя [36] от a до b и пользуясь условиями [21], получим

$$[37] \quad y_1'(b, \lambda_s)\eta(b, \lambda_s) = \int_a^b \rho y_1^2 dx.$$

Отсюда видно, что $\eta(b, \lambda_s) \neq 0$, так что $\lambda = \lambda_s$ есть простой корень D , при чем разложение D вблизи $\lambda = \lambda_s$ имеет вид

$$[38] \quad D = -(\lambda - \lambda_s)\eta(b, \lambda_s) + \dots$$

Подставляя это выражение в [24] и пользуясь [37], получим, что та часть разложения функции Грина, которая при $\lambda = \lambda_s$ обращается в бесконечность (так называемая главная часть разложения вблизи полюса $\lambda = \lambda_s$), равна

$$[39] \quad \frac{y_1(x, \lambda_s)y_1(\xi, \lambda_s)}{(\lambda_s - \lambda) \int_a^b \rho y_1^2 dx}$$

или на основании [18]

$$[40] \quad \frac{\varphi_s(x)\varphi_s(\xi)}{\lambda_s - \lambda}.$$

Можно показать, что, сложив главные части разложения вблизи каждого из полюсов, мы получим всю функцию Грина, другими словами, что

$$[41] \quad G(x, \xi, \lambda) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\varphi_s(x)\varphi_s(\xi)}{\lambda_s - \lambda}.$$

Разложение это сходится при всех значениях x и ξ в данном промежутке.

§ 7. РАЗЛОЖЕНИЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ПО ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМ ФУНКЦИЯМ

После того, как получено разложение функции Грина, нетрудно получить такое же разложение и для всякой функции, которая может быть представлена в виде [25]. Так как [25] есть решение уравнения [20], то в таком виде может быть представлена всякая функция, имеющая непрерывную первую и интегрируемую вторую производную и удовлетворяющая тем же предельным условиям, что и функция Грина. Таким образом, можно считать доказанной разложимость всякой функции, удовлетворяющей перечисленным условиям, в ряд по фундаментальным функциям.

Разложение это будет иметь вид

$$[42] \quad F(x) = \sum_{s=1}^{\infty} \alpha_s \varphi_s(x),$$

где

$$[43] \quad \alpha_s = \int_a^b \rho(x) \varphi_s(x) F(x) dx.$$

Величины α_s носят название коэффициентов Фурье.

Возводя обе части равенства [42] в квадрат, умножая на $\rho(x)$ и интегрируя от a до b , получим, в силу свойств ортогональности функций $\varphi_s(x)$, равенство

$$[44] \quad \int_a^b \rho(x) [F(x)]^2 dx = \sum_{s=1}^{\infty} \alpha_s^2.$$

Это свойство системы функций $\varphi_s(x)$ носит название *замкнутости*; оно показывает, что не существует такой функции $\psi(x)$, которая была бы ортогональна ко всем $\varphi_s(x)$. В самом деле, для $\psi(x)$ все коэффициенты Фурье должны были бы равняться нулю, а следовательно должен был бы равняться нулю и интеграл [44]; но это возможно только тогда, когда $\psi(x)$ тождественно равно нулю, ибо $\rho(x)$, по предположению, положительно.

Обратимся теперь к решению неоднородного уравнения [20]. На основании формул [25] и [41] решение этого уравнения будет

$$[45] \quad y = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\alpha_s \varphi_s(x)}{\lambda - \lambda_s},$$

где

$$[46] \quad \alpha_s = \int_a^b \rho(x) \varphi_s(x) f(x) dx.$$

Из этой формулы следует, что, если $f(x)$ удовлетворяет условию

$$[47] \quad \int_a^b \rho(x) \varphi_n(x) f(x) dx = 0,$$

то уравнение [20] имеет решение также и при $\lambda = \lambda_n$. Упомянутое условие называют ортогональностью функции $f(x)$ по отношению к $\varphi_n(x)$.

§ 8. АССИМПТОТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ БОЛЬШИХ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ЧИСЕЛ

Покажем, как можно вывести асимптотическое выражение для больших характеристических чисел.

Подстановкой

$$[48] \quad z = \sqrt[4]{\rho p y},$$

$$[49] \quad t = \frac{1}{T} \int_a^x \sqrt{\frac{\rho}{p}} dx,$$

где

$$[50] \quad T = \int_a^b \sqrt{\frac{\rho}{p}} dx,$$

уравнение [1] приводится к виду

$$[51] \quad \frac{d^2 z}{dt^2} + \lambda' z = z \cdot r(t),$$

где $\lambda' = \lambda T^2$, а $r(t)$ есть некоторая непрерывная функция. Промежуток от a до b для x переходит в промежуток от 0 до 1 для t , а однородные предельные условия для y переходят в такие же условия для z .

Уравнение [51] равносильно интегральному уравнению

$$[52] \quad z(x) = c \sin \sqrt{\lambda'} (x - \alpha) + \frac{1}{\sqrt{\lambda'}} \int_0^x z(t) r(t) \sin \sqrt{\lambda'} (x - t) dt,$$

где c и α произвольные постоянные. Отсюда видно, что при больших значениях λ' функция $z(t)$ будет мало отличаться от $c \cdot \sin \sqrt{\lambda'} (t - \alpha)$. Чтобы это выражение обращалось в нуль при $t = 0$ и при $t = 1$, необходимо, чтобы $\sqrt{\lambda'} = n\pi$. Отсюда получается для первоначального параметра λ предельное равенство

$$[53] \quad \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{\lambda_s}{s^2} = \frac{\pi^2}{T^2}.$$

Напомним, что в случае бесконечного промежутка полученная здесь оценка больших характеристических чисел не имеет места, и вопрос о разложении функции Грина по фундаментальным функциям требует каждый раз особого исследования, при чем существенным является наличие или отсутствие «сложного спектра».

§ 9. ПРИМЕР

В качестве простейшего примера рассмотрим оператор

$$L(y) = y''$$

и соответствующее ему уравнение

$$[54] \quad y'' + \lambda y = 0.$$

Для промежутка $(0, 1)$ и предельных условий первого рода функция Грина $G(x, \xi, 0)$ будет

$$[55] \quad \begin{aligned} G(x, \xi, 0) &= (1 - \xi)x \text{ при } x \leq \xi \\ G(x, \xi, 0) &= (1 - x)\xi \text{ при } x \geq \xi. \end{aligned}$$

Интегралы $y_1(x, \lambda)$ и $y_2(x, \lambda)$, удовлетворяющие условиям [21], будут

$$[56] \quad \begin{cases} y_1(x, \lambda) = \frac{\sin x \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}}, \\ y_2(x, \lambda) = \frac{\sin(x-1) \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}}. \end{cases}$$

Интегралы y_1 и y_2 перестанут быть линейно независимыми, когда

$$[57] \quad D(\lambda) = -\frac{\sin \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} = 0.$$

Поэтому характеристические числа равны

$$[58] \quad \lambda_s = s^2 \pi^2,$$

а соответствующие им фундаментальные функции

$$[59] \quad \varphi_s(x) = \sqrt{2} \sin s \pi x.$$

Формула [24] дает для функции Грина выражение

$$[60] \quad \begin{cases} G(x, \xi, \lambda) = -\frac{\sin x \sqrt{\lambda} \sin(\xi-1) \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda} \sin \sqrt{\lambda}} \quad x \leq \xi \\ G(x, \xi, \lambda) = -\frac{\sin \xi \sqrt{\lambda} \sin(x-1) \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda} \sin \sqrt{\lambda}} \quad x \geq \xi. \end{cases}$$

Разложение функции Грина по фундаментальным функциям имеет вид

$$[61] \quad G(x, \xi, \lambda) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin n \pi x \sin n \pi \xi}{n^2 \pi^2 - \lambda}.$$

§ 10. НАЛИЧИЕ МАЛОГО ПАРАМЕТРА В ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ (ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ)

Положим, что наше уравнение содержит некоторый малый параметр μ .

$$[62] \quad \frac{d^2 y}{dx^2} + [q(x) - \mu r(x) + \lambda \rho(x)] y = 0.$$

Допустим, что мы нашли характеристические числа λ_s^0 и фундаментальные функции $\varphi_s^0(x)$ для $\mu = 0$. Спрашивается, как изменятся эти величины, когда μ примет малое значение, отличное от нуля.

Предположим, что λ_s и $\varphi_s(x)$ могут быть разложены по степеням μ

$$[63] \quad \begin{cases} \lambda_s = \lambda_s^0 + \mu \lambda_s^1 + \dots \\ \varphi_s(x) = \varphi_s^0(x) + \mu \varphi_s^1(x) + \dots \end{cases}$$

Мы ограничимся первым приближением и покажем, как можно вычислить λ_s^1 и $\varphi_s^1(x)$.

Подставляя [63] в [62], получим

$$[64] \quad \frac{d^2 \varphi_s^1}{dx^2} + (q + \lambda_s^0 \rho) \varphi_s^1 = (r - \lambda_s^1 \rho) \varphi_s^0.$$

Мы видим, что $\varphi_s^1(x)$ удовлетворяет неоднородному уравнению при λ равном характеристическому числу. Чтобы это уравнение имело решение, необходимо, чтобы правая часть была ортогональна к соответствующей фундаментальной функции $\varphi_s^0(x)$. Это дает условие

$$[65] \quad \lambda_s^1 = \int_a^b r(x) [\varphi_s^0(x)]^2 dx$$

для определения λ_s^1 . Решение же уравнения [64] будет, по формулам § 7, и в силу ортогональности,

$$[66] \quad \varphi_s^1(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n^0(x)}{\lambda_s - \lambda_n} \int_a^b r(x) \varphi_s^0(x) \varphi_n^0(x) dx,$$

где штрих у знака суммы означает, что следует пропустить член номер s . К этому выражению можно было бы еще прибавить член вида

$$c \cdot \varphi_s^0(x),$$

но для того, чтобы функция $\varphi_s(x)$ [63] с точностью до величин порядка μ^2 была нормальной, нужно положить постоянную c равную нулю.

§ 11. УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

В предыдущих параграфах мы рассматривали исключительно обыкновенные дифференциальные уравнения. Что касается уравнений в частных производных, то в важных на практике частных случаях решение их может быть приведено, посредством «разделения переменных», к последовательному решению нескольких обыкновенных дифференциальных уравнений. Изложенная выше теория прилагается, однако, с соответствующими изменениями, которых мы вкратце коснемся, и к «самосопряженным» уравнениям в частных производных.

«Самосопряженным» называется линейный дифференциальный оператор $L(u)$ (например, оператор Лапласа) в том случае, если выражение

$$[67] \quad v L(u) - u L(v)$$

есть [сумма производных по координатам (*)] от выражений, содержащих производные от функций u и v не выше первого порядка.

Например, для оператора Лапласа Δu

$$[68] \quad v \Delta u - u \Delta v = \operatorname{div} (v \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} v).$$

Главнейшие отличия теории для уравнений в частных производных от рассмотренной выше являются следствием того, что здесь одному характеристическому числу может соответствовать несколько линейно независимых фундаментальных функций.

Если для характеристического числа λ_n существуют m фундаментальных функций, то говорят, что это число кратности m (это не значит, что оно есть кратный полюс функции Грина).

Выбор этих m функций остается несколько неопределенным; мы можем заменить данный ряд функций

$$[69] \quad \varphi_n^{(1)}, \varphi_n^{(2)}, \dots, \varphi_n^{(m)}$$

их линейными комбинациями с постоянными коэффициентами вида

$$[70] \quad \overline{\varphi}_n^{(k)} = \alpha_1^{(k)} \varphi_n^{(1)} + \alpha_2^{(k)} \varphi_n^{(2)} + \dots + \alpha_m^{(k)} \varphi_n^{(m)} \quad (k = 1, 2, \dots, m).$$

Из определения функций [69] еще не вытекает, что они ортогональны между собой; но мы можем подобрать коэффициенты $\alpha_i^{(k)}$ так, чтобы новые функции [70] были ортогональны и нормальны. Функция $\overline{\varphi}_n^{(k)}$ определяется при этом не однозначно, а лишь с точностью до ортогональной подстановки.

(*) Обобщенная расходимость (дивергенц).

Для возможности решения неоднородной задачи при $\lambda = \lambda_n$ необходимо, чтобы свободный член уравнения был ортогонален (в смысле § 7) ко *всем* фундаментальным функциям, соответствующим этому характеристическому числу.

В случае появления малого параметра в дифференциальном уравнении, кратное характеристическое число λ_n может разбиться на несколько различных чисел, сумма кратностей которых равна кратности первоначального числа λ_n . В частности, новые характеристические числа могут быть и простыми.

§ 12. ПРИМЕР УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

В качестве примера уравнения с кратными характеристическими числами рассмотрим уравнение

$$[71] \quad \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0$$

с областью изменения переменных

$$[72] \quad 0 \leq \vartheta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

(поверхность шара, если ϑ и φ сферические координаты) и с предельными условиями: конечность, однозначность и непрерывность на всей поверхности шара ($\vartheta = 0$ и $\vartheta = \pi$ суть особенные точки уравнения).

В этом случае характеристическими числами являются значения

$$[73] \quad \lambda_n = n(n+1),$$

при чем числу λ_n соответствует $2n+1$ фундаментальных функций, а именно

$$[74] \quad P_n, \cos m\varphi P_n^{(m)}, \sin m\varphi P_n^{(m)},$$

где $P_n = P_n(\cos \vartheta)$ есть полином ЛЕЖАНДРА, а

$$[75] \quad P_n^{(m)} = (\sin \vartheta)^m \frac{d^m}{d(\cos \vartheta)^m} P_n(\cos \vartheta).$$

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
Предисловие	3
Затруднения теории квантов до «новой квантовой механики» (<i>П. С. Тартаковский</i>)	5
Основы новой квантовой теории Гейзенберга-Борна (<i>Г. А. Гринберг</i>) .	21
Аналогия между механикой и оптикой (<i>Н. Н. Андреев</i>)	43
Волновая механика Шредингера (<i>В. Р. Бурман</i>)	53
Теория Шредингера и общая теория относительности (<i>В. К. Фредерикс</i>) .	83
Квантовая механика и явление Комптона (<i>Б. Н. Финкельштейн</i>)	99
Математический аппарат теории Шредингера (<i>В. А. Фок</i>)	111
