

которое аналогично уравнению, полученному из (2.1.27) прибавлением неоднородного члена, содержащего силовую функцию. Уравнение для скалярного поля без свободного члена называется уравнением Клейна-Гордона; оно пригодно для описания поведения скалярного мезонного поля. Аналогичное уравнение для четырехмерного векторного потенциала называется *уравнением Прока*; его можно применить к описанию поведения частицы, имеющей единичный спин (если такая частица существует!). Соответствующие уравнения для полей в случае $\mu = \epsilon = 1$ (свободное пространство), если ток равен нулю, имеют вид

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \alpha^2 \mathbf{A}, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \text{div } \mathbf{H} &= 0, \quad \text{div } \mathbf{E} = -\alpha^2 c \varphi, \\ \mathbf{H} &= \text{rot } \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \\ \text{div } \mathbf{A} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.5.38)$$

{при другой калибровке см. стр. 205 и уравнение (3.4.21)].

Наличие этого дополнительного члена заметно влияет на решение, как это имело место и в случае струны. Поля быстро стремятся к нулю везде, кроме ближайших окрестностей заряда или тока. Например, потенциал вокруг точечного заряда равен $Qe^{-\mu r}/r$ и стремится к нулю много быстрее, чем обычный потенциал Q/r . Подобная потенциальная функция¹⁾ рассматривалась при изучении связи между нуклонами (протонами или нейтронами) в атомном ядре. Поэтому уравнения Прока, а также и уравнение Клейна — Гордона (для скалярного случая) могут быть использованы в теории ядра.

2.6. Квантовая механика

На протяжении всей этой главы мы указывали случаи, когда «сглаженное», непрерывное поле может заменить распределение масс и зарядов, имеющее на самом деле дискретный характер. Пока мы интересовались макроскопическими явлениями, мы могли вместо беспорядочного распределения частиц рассматривать регулярную функцию положения, значение которой пропорционально средней плотности частиц. Однако, введя электромагнитное поле, мы приходим к существенно новой связи между непрерывными полями и дискретными частицами, к связи, которая является основой современной квантовой теории.

Существует два основных различия между прежними взаимосвязями полей и частиц и новыми, квантовыми связями между ними. Прежде всего, величина классического поля пропорциональна средней плотности частиц или, что обычно то же самое, вероятности наличия частицы. В квантовой же теории *квадрат* модуля поля пропорционален вероятности наличия частицы. Это различие более существенно, чем могло бы показаться с первого взгляда. Оно обозначает, например, что классические поля всегда выражаются *действительными числами*, так как они должны равняться плотностям или вероятностям, являющимся *действительными числами*. Правда, во многих случаях и для классических полей мы будем выполнять наши вычисления, пользуясь комплексными числами, но всегда при этом будет ставиться условие, что только

¹⁾ Потенциал Юкава. — *Прим. ред.*

действительная часть (или в некоторых случаях только мнимая часть) этих чисел представляет поле. Напротив, в квантовой механике само поле может быть комплексной величиной, так как только квадрат его модуля (который всегда действителен) пропорционален вероятности наличия частицы. Более того, во многих случаях важно, чтобы комплексная величина, сопряженная квантовому полю, была отлична от самого поля; таким образом, поле необходимо должно быть комплексным.

Во-вторых, связь между классическим полем и соответствующим ему распределением частиц только допускается, но в принципе не требуется. В принципе можно всегда отказаться от понятия поля и рассчитывать индивидуальные движения самих частиц. Производить расчеты с непрерывным полем, конечно, несравненно легче, чем вычислять движения отдельных частиц, но выбор того или другого является делом соглашения и отнюдь не обязателен. С другой стороны, связь между квантовыми полями и соответствующими им частицами необходима, а не просто допускается. Основные принципы квантовой теории запрещают нам отказываться от понятия поля и рассчитывать подробно движения отдельных частиц. Они утверждают, что полное описание положений и движений соответствующих частиц невозможно получить экспериментально и что поэтому такое описание не имеет физического смысла. Только плотность вероятности, пропорциональная квадрату модуля поля, может быть измерена и имеет физический смысл.

Смысл этих общих положений может быть лучше понят на специальных примерах.

Фотоны и электромагнитное поле. Отложим на время вопрос о связи между движениями электронов и 4-вектором заряда-тока; предположим, что каким-то способом мы нашли значения J и ρ , с помощью которых можно рассчитать электромагнитное поле, подчиненное граничным условиям, налагаемым потребностями эксперимента. Сосредоточим наше внимание на влияниях такого поля на другие заряженные частицы, электроны и ионы.

Когда электромагнитная волна наталкивается на фотографическую пластиинку или поглощается металлической поверхностью, количество энергии на квадратный сантиметр фронта волны, которое может быть отдано галоидному кристаллу или затрачено на приведение фотоэлектрона в движение, равно интенсивности радиации, величине вектора Пойнтинга ($c/4\pi$) ($E \times H$). Эта величина пропорциональна квадратам амплитуд потенциалов, а в случае, когда эти потенциалы являются комплексными величинами, она пропорциональна квадратам их модулей. Поле будет действовать с данной энергией на галоидные крупинки или на электроны, движущиеся по своим траекториям; полная потеря энергии будет равна произведению общего количества частиц, испытавших воздействие, на среднюю величину энергии, отданной каждой частице. Так как частицы, испытавшие воздействие, распределены не непрерывно, нельзя надеяться на то, что ответ будет однородным вдоль всего фронта волны. Однако можно ожидать, что чем сильнее радиация, тем большее число частиц подвергнется значительному воздействию и в силу этого окончательный результат будет более однородным. Это в действительности и происходит; особенности квантовой теорииказываются только при уменьшении интенсивности (при неизменной частоте) до очень малых значений.

Само поле будет подобно непрерывному как при больших, так и при малых значениях его интенсивности. Можно было бы ожидать, что

реакция фотографической пластиинки или фотоэлектронов в металле постараётся оставаться, насколько возможно, непрерывной при уменьшении интенсивности, причем уменьшение энергии будет происходить более или менее в равной степени как из-за уменьшения числа частиц, подвергшихся воздействию, так и из-за уменьшения количества энергии, поглощенной каждой частицей. Однако, как ясно показывают многочисленные опыты, этого не происходит. Энергия, поглощенная фотоэлектроном, не уменьшается; только количество порождаемых фотоэлектронов уменьшается при уменьшении интенсивности. Это обстоятельство проще всего объяснить, если предположить, что энергия электромагнитного поля переносится дискретными частицами, каждая из которых несет в себе определенное количество энергии. Когда частица света поглощается фотоэлектроном, она оставляет одно и то же количество энергии, какова бы ни была интенсивность радиации. Изменение интенсивности отражается только на *количестве имеющихся частиц света*, но не влияет на их индивидуальную энергию.

Как повторно показали многочисленные опыты, каждая из этих «частиц» света, называемых *фотонами*, несет в себе энергию, пропорциональную частоте ν поля радиации $E = h\nu$, где h — постоянная Планка. Скорости этих частиц в свободном пространстве равны, конечно, скорости света c . Плотность их распределения определяется величиной интенсивности соответствующего классического поля. Такое описание электромагнитного поля с помощью фотонов не является конкурирующим «объяснением» фактов электромагнитного взаимодействия с веществом; оно дает дополнительное описание этих фактов не более и не менее верное, чем описание с помощью классического поля. Фотоны не являются «реальными» в классическом смысле, так как мы не можем ни рассчитать траекторию отдельного фотона, ни предсказать точно его положение и направление движения в данный момент времени. Лучшее, что можно сделать, — это подсчитать вероятность наличия фотона в данной точке в данный момент; эта вероятность выражается через квадрат значения классического поля в этой точке в этот момент времени. Частица не имеет смысла отдельно от интенсивности поля, и само поле может быть сделано ощутимым только при помощи фотонов.

В качестве поясняющего примера рассмотрим поток света, падающий на поверхность металла, снабженную приспособлением для регистрации выбрасываемых фотоэлектронов. Предположим, что интенсивность в разных точках поверхности, подсчитанная с помощью классических полей, дается графически кривой, изображенной на верхней части рис. 2.25. Если интенсивность очень мала и экспозиция короткая, выделяется только небольшое число фотоэлектронов, благодаря чему очень трудно восстановить кривую распределения интенсивности по изображениям фотоэлектронов. Однако если интенсивность и экспозиция возрастают, выделяется все больше и больше фотоэлектронов и относительные значения плотности точек могут быть измерены все с большей и большей точностью. При очень большой интенсивности распределение точек становится совсем «гладким» и с большой точностью следует изменениям классического поля.

Даже электростатические силы, действующие между двумя постоянными зарядами, могут быть «объяснены» с помощью фотонов. Наличие зарядов вызывает обмен фотонов; некоторое количество их появляется у одного заряда и исчезает у другого. Это количество связано с энергией поля, и комбинированное действие этих фотонов «производит» силы, могущие быть измеренными и действующими на каждый заряд. В этом случае для подсчета этих сил удобнее, конечно, пользоваться точкой

зрения поля, так же как при расчете эффекта Комптона удобнее стоять на точке зрения частиц.

Энергия фотона пропорциональна частоте поля. Но энергия частицы равна временной компоненте 4-вектора, пространственные компоненты которого пропорциональны импульсу частицы, а частота является временной компонентой 4-вектора, пространственные компоненты которого пропорциональны волновому числу (величине, обратной длине волны) волны. Таким образом, нара комбинация волны и частицы приводит

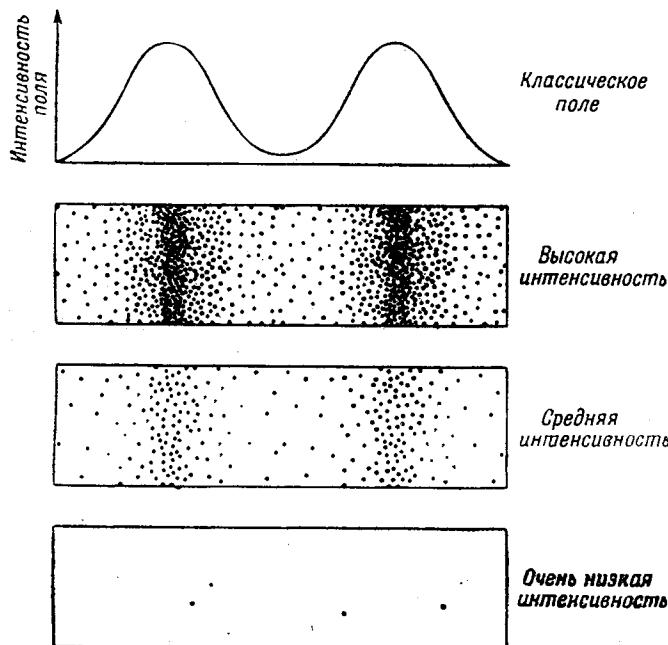


Рис. 2.25.

Точки указывают места, в которые попадают отдельные фотоны. При высокой интенсивности плотность распределения соответствует классическому полю; при низкой интенсивности ясно заметен случайный характер процесса.

к следующим соотношениям между энергией и частотой и между импульсом и волновым числом:

$$\text{энергия} = h\nu; \text{ импульс} = \frac{h}{\lambda}, \quad (2.6.1)$$

которые содержат «квантовую постоянную» h .

Фотоны и электромагнитные волны являются не единственным примером этой новой, сложной двойственности между волной и частицей. Опыты Дэвиссона и Г. П. Томсона, а также многих последующих исследователей доказали, что элементарные частицы материи — электроны, протоны и нейтроны — управляются «волновой функцией», непрерывным полем, удовлетворяющим волновому уравнению (подробности этого будут рассмотрены в этом параграфе позже). Детали траекторий отдельных частиц даже в принципе не могут быть измерены с произвольно большой точностью. Мы можем подсчитать и предсказать только вероятность наличия частицы в данной точке в данный момент времени; эта вероятность пропорциональна квадрату модуля волновой функции. Параллелизм со случаем фотон — поле дополняется тем, что энергия и импульс частицы

также связаны с частотой и волновым числом волновой функции уравнениями (2.6.1).

Соотношение неопределенности. Теперь целесообразно рассмотреть подробнее вторую особенность квантового поля — тот факт, что невозможно «отказаться» от волновой функции для получения подробности движения отдельной частицы. Предположим, что луч монохроматического света (или пучок электронов) падает на экран, имеющий две щели на некотором расстоянии друг от друга, как показано на рис. 2.26. Некоторая часть света (или электронного пучка) пройдет через щели и может быть обнаружена на пластинке P . Согласно классической волновой теории, интенсивность освещения пластины изменяется благодаря интерференции; именно точки, в которых интенсивность наибольшая, расположены под таким углом θ , для которого $\sin \theta = n\lambda/a$, а точки минимальной интенсивности — под углом θ , для которо-

$$\text{то } \sin \theta = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\lambda}{a}, \text{ где } n \text{ — це-} \\ \text{лое число.}$$

Наша чувствительная пластина укажет отдельные частицы, фотоны или электроны, и при значительной интенсивности плотность таких частиц вполне соответствует интерференционной картине, получающейся с помощью волнового уравнения. Чтобы понять, почему мы не можем

«отказаться» от плотности вероятности данной волновой функции, попытаемся сделать это и посмотрим, к чему это приведет нас. Попытаемся проследить за фотоном (или электроном), когда он проходит через щель и падает на пластиинку, где и обнаруживается. Не все частицы движутся по одному и тому же пути, так как не все они попадают в одно и то же место пластиинки. Но проходит ли фотон, за путем которого мы пытаемся следить, через одну щель, или через другую, или через обе щели? Если он проходит только через одну щель, почему оказывается настолько вероятнее, что он попадет в точки, соответствующие углам θ , где $\sin \theta = n\lambda/a$, чем в точки, соответствующие промежуточным углам? Утверждение, что вероятность того, что фотон попадет в некоторую данную точку пластиинки, зависит от расстояния a между щелями, через которую он прошел, и щелью, через которую он не проходил, приводит к абсурду; это и доказывает невозможность достаточно точного исследования путей отдельных частиц. До тех пор пока местонахождение фотонов (или электронов) определяется через квадрат величины волновой функции, попытки описания пути отдельной частицы всегда будут приводить нас к подобным логическим противоречиям.

Мы можем попытаться заставить фотоны пройти через щель A , закрыв щель B . Но тогда мы не получим интерференционных полос на пластиинке. Этим мы не разрешаем парадокса, мы только разрушаем эксперимент.

Из сказанного следует, что мы не можем быть уверены в том, каков поперечный импульс фотона на протяжении его пути от щели до пластиинки, и что любая попытка точно измерить этот импульс разрушает эксперимент так, что ничто другое не может быть точно измерено. Мы могли бы, например, попытаться измерить поперечный импульс, измерив

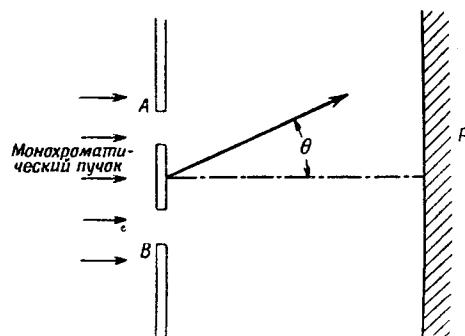


Рис. 2.26. Интерференция света в случае двух щелей.

импульс, сообщенный экрану, когда частица проходит через щель и изменяет направление своего движения. Но для того чтобы измерить импульс отдачи, нужно, чтобы экран имел малую массу и был свободно подвешен так, чтобы он мог заметно двигаться при отдаче; но если все это имеет место, мы не можем быть уверены в точном положении экрана, когда частица проходит через щель.

Факт состоит в том, что мы никогда не можем измерить одновременно положение и импульс с произвольно большой степенью точности. Рис. 2.27 показывает, как сделать это утверждение более определенным. Здесь частицы должны пройти через одну щель шириной Δx . Согласно теории дифракции Фраунгофера, волны, проходящие через щель шириной Δx , будут дифрагировать, разворачиваясь в расходящийся пучок,

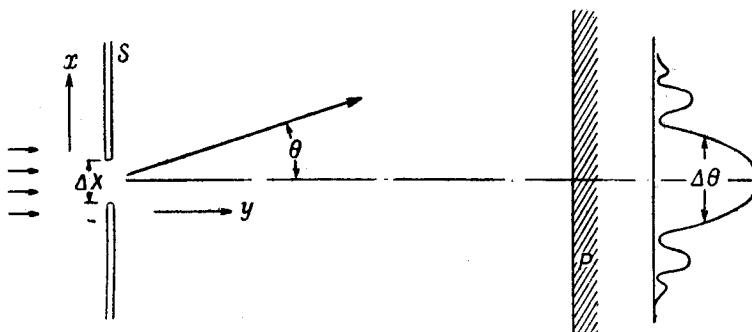


Рис. 2.27. Дифракция света, проходящего через единственную щель шириной Δx .

Кривая справа показывает классическое распределение интенсивности освещения экрана P .

окруженный дифракционными полосами, как показано в правой части рисунка на кривой сглаженной интенсивности. Теория дифракции утверждает, что угловая ширина $\Delta\theta$ основного пучка приближенно равна $\lambda/\Delta x$. Но этот угол является мерой нашей неуверенности относительно поперечного импульса фотона после того, как он прошел через щель; вероятнее всего, что значения этого поперечного импульса лежат между границами $\frac{1}{2}\Delta p \approx \frac{1}{2}p\Delta\theta$ и $-\frac{1}{2}\Delta p \approx -\frac{1}{2}p\Delta\theta$, где p — импульс частицы в направлении оси y , т. е. в направлении первоначального движения частицы. Но, согласно уравнению (2.6.1), имеем $p = h/\lambda$, так что $\Delta p \approx p\Delta\theta \approx (h/\lambda)(\lambda/\Delta x)$ или

$$\Delta p \Delta x \ll h. \quad (2.6.2)$$

Это соотношение называется *соотношением неопределенности Гейзенberга*: оно является одним из основных соотношений квантовой физики.

Приспособление со щелью, показанное на рис. 2.27, дает метод измерения положения частицы только в направлении x . Пучок частиц, движущихся в направлении y , падает на экран. Положение любой из частиц в пучке до ее удара об экран неизвестно, но после того, как она прошла через щель, мы можем сказать, что знаем ее координату x (или по крайней мере знали ее координату x сразу после того, как она прошла через щель) в пределах неопределенности Δx . Но так как поведение частицы подчиняется волновому уравнению с соответствующей частотой и длиной волны, данными в уравнении (2.6.1), самый факт ее

прохождения через щель влечет за собой неопределенность относительно направления ее последующего движения; самый факт, что мы измерили ее координату x , влечет за собой неопределенность в компоненте по оси x ее импульса. Соотношение волна — частица нуждается во взаимосвязи между неопределенностью в нашем измерении x и неопределенностью в соответствующем импульсе; эта связь дана в уравнении (2.6.2), которое содержит вездесущую постоянную h . Чем точнее мы измеряем x (то есть чем уже щель), тем менее точно мы знаем импульс после измерения.

Можно представить себе многие другие эксперименты для измерения положения и импульса, но анализ показывает, что все они приводят к тому же результату, пока мы имеем в виду квант, то есть взаимосвязь волна — частица. Например, мы можем пустить луч света на электрон и определить положение этого электрона, наблюдая под микроскопом отраженный свет. Однако свет при отражении от электрона ведет себя сам подобно частице, и это отражение сообщает электрону известный импульс отдачи. Мы не можем быть уверены относительно направления этой отдачи, так как линза микроскопа имеет конечные размеры, и мы не знаем, через какую часть линзы прошел отраженный фотон, прежде чем мы его увидели. Мы могли бы уменьшить неопределенность относительно направления импульса отдачи, уменьшив угловую апертуру микроскопа, но по законам дифракции это уменьшило бы разрешающую силу микроскопа и поэтому увеличило бы неопределенность относительно положения, в котором находился электрон в момент столкновения. Если провести все преобразования, то связь между неопределенностью в положении электрона в момент отражения фотона и неопределенностью в последующем импульсе электрона снова дается соотношением (2.6.2).

Затруднение (если это можно назвать затруднением) состоит в том, что физические сущности нельзя дробить неограниченно. Мы не можем осветить электрон бесконечно малым количеством света; наименьшее возможное количество света все еще нарушает состояние электрона на конечную величину. Самый факт, что материя (а также электромагнитное излучение и т. д.) встречается только в конечных порциях, приводит к неустранимым неточностям во всех наших экспериментах, что делает неизбежным соотношение неопределенности. Рассматриваем ли мы взаимосвязь «волна — частица», содержащуюся в уравнениях (2.6.1), как «объяснение» соотношения неопределенности, содержащегося в уравнении (2.6.2), или наоборот, оба они являются различными выражениями следствий из существенно атомистического взаимодействия поля и материи; обе эти точки зрения имеют общее клеймо — постоянную h .

Сопряженные переменные и скобки Пуассона. Положение x и импульс p_x являются на языке классической динамики каноническими сопряженными переменными. Соотношение неопределенности сохраняет силу для любой пары сопряженных переменных: угол и момент количества движения, энергия и время и т. д. Мы рассмотрим этот вопрос классической динамики несколько подробнее в ближайшей главе; здесь мы соплемся только на некоторые выводы теории преобразований прикосновения, чтобы осветить это понятие сопряженных переменных. Предположим, что мы можем полностью выразить конфигурацию некоторой консервативной динамической системы в данный момент t с помощью некоторой подходящей системы координат q_1, q_2, \dots, q_n . Мы можем тогда выразить *кинетический потенциал* $L = T - V$, разность между кинетической и потенциальной энергией (иногда называемую *функцией Лагранжа*), через координаты q и их производные по времени $q_m = dq_m/dt$.

Импульс p_m , сопряженный координате q_m , определяется тогда для рассматриваемой динамической системы формулой

$$p_m = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_m}. \quad (2.6.3)$$

Кинетический потенциал, полная энергия или какое-либо другое свойство системы может быть выражено через переменные q и p вместо переменных q и \dot{q} . По многим причинам употребление величин p и q предпочтительнее перед применением величин \dot{q} и q .

Существуют, конечно, и многие другие системы координат и сопряженных импульсов, с помощью которых можно полностью выразить поведение динамической системы. Преобразование, позволяющее перейти от величин $q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n$, описывающих состояние системы, к другим переменным $Q_1, Q_2, \dots, Q_n; P_1, P_2, \dots, P_n$, с помощью которых также может быть описано состояние той же системы, называется *преобразованием прикосновения*. Эти новые координаты Q_1, Q_2, \dots, Q_n можно выбрать любым способом, но так, чтобы и с их помощью можно было бы полностью описать рассматриваемую конфигурацию в любой момент. Кинетический потенциал L системы может быть выражен через Q и \dot{Q} , и тогда величины P могут быть найдены из формулы (2.6.3).

Другой способ нахождения соотношений, включающих величины Q и P , основан на применении скобок Пуассона. Предположим, что мы выразили две функции динамической системы u и v через исходные переменные q и p . Скобки Пуассона функций u и v определяются тогда равенством

$$(u, v) = \sum_{m=1}^n \left[\frac{\partial u}{\partial p_m} \frac{\partial v}{\partial q_m} - \frac{\partial u}{\partial q_m} \frac{\partial v}{\partial p_m} \right]. \quad (2.6.4)$$

Эти выражения подробнее будут рассмотрены в гл. 3.

Значение скобки (u, v) будет одним и тем же независимо от выбора координат q_1, q_2, \dots, q_n , если только эти координаты достаточны для полного описания конфигурации системы и если сопряженные импульсы определены равенствами (2.6.3). Легко убедиться в том, что

$$(u, p_m) = - \frac{\partial u}{\partial q_m} \quad \text{и} \quad (u, q_m) = \frac{\partial u}{\partial p_m}.$$

Интересное и полезное свойство таких выражений состоит в том, что если u и v являются сопряженными переменными, то их скобка Пуассона равна единице. Таким образом, полная совокупность координат Q_m и сопряженных импульсов P_m для рассматриваемой системы удовлетворяет уравнениям

$$\begin{aligned} (Q_i, Q_j) &= 0, \quad (P_i, P_j) = 0, \quad i, j = 1, \dots, n, \\ (P_i, Q_j) &= 0, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad i \neq j, \\ (P_m, Q_m) &= 1, \quad m = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.6.5)$$

Мы находим также, что $(u, v) = 1$, когда u и v выражены через любые новые координаты Q и импульсы P , если эта скобка была равна единице в старой системе q и p .

Наиболее общий вид соотношения неопределенности приобретает поэтому для любых двух функций u и v динамических переменных p и q данной системы. Если скобка Пуассона (u, v) равна постоянной K (если

она равна K в одной системе координат, то она будет равна K и во всякой другой), то произведение неопределенностей при одновременном измерении u и v равно Kh ; вообще

$$\Delta u \Delta v \simeq |(u, v) h|_{\text{ср.}}, \quad (2.6.6)$$

где индекс «ср.» указывает на то, что должно быть взято среднее в смысле квантовой механики (оно определено на стр. 224), если (u, v) не является постоянной.

Взаимосвязь волна — частица, а также соотношение неопределенностей, павязанные нам экспериментальными данными, подразумеваю и требуют такую формулировку основ динамики, которая говорила бы нам о том, что мы должны знать относительно поведения системы, но которая не говорила бы о том, чего мы не можем знать.

В итоге рассуждений этого пункта мы можем сказать, что двойственность волна — частица, проявляемая как излучением, так и материи, требует существенного изменения описания физических явлений, данного Ньютоном и Максвеллом, описания, в котором все координаты и соответствующие им импульсы могли быть точно измерены, а потому траектории частиц были полностью известны. Квантовая механика утверждает, что такие точные знания невозможны, что чем более настойчивы попытки получить их, тем более сильно исказится траектория. Эта неотъемлемая неопределенность вытекает из того факта, что имеется своего рода волна, связанная с частицей; эта волна может интерферировать сама с собой. Интенсивность волны (т. е. квадрат ее модуля) связана с вероятностью нахождения частицы в данной точке. Проблема единственной частицы является центральной проблемой квантовой механики; эта проблема будет некоторое время привлекать наш главный интерес. Если ее решить, все еще остается проблема совокупности частиц, свободных или взаимодействующих. Эта проблема включает в себя квантование полей, в том числе, например, и поля вероятностей, рассмотренного выше; в последнем случае часто говорят также о вторичном квантовании:

Основные постулаты квантовой теории. Количественная формулировка этих идей требует применения символического исчисления состояний такого рода, как затронутое в гл. 1. Состояние системы имеет смысл, хорошо определенный в классической физике. Например, траектория или орбита частицы описывает ее состояние; прежде чем описывать состояние плоской электромагнитной волны, нужно знать направление вектора поляризации и т. д. В квантовой физике может быть известно не так много фактов относительно системы. Тем не менее, если бы мы пожелали остаться в полном неведении относительно одной из пары сопряженных переменных, мы могли бы другую определить точно. Вообще здесь имеется некоторое количество измерений, которые можно выполнить одновременно. Совокупность результатов таких измерений может быть принята за описание состояния системы. В самом деле, в квантовой физике это является максимумом того, что можно сказать относительно системы.

Измерение, выполненное над системой, изменяет систему. Для наглядного представления этого факта лучше всего построить абстрактное векторное пространство, вектор которого представляет собой данное состояние системы. Это, конечно, можно сделать в классической физике так же, как и в квантовой; этот прием мы применяли, например, при изучении связанных осцилляторов в параграфе, посвященном абстрактным пространствам, или при изучении колебаний струны в этой главе. Как мы сказали, влияние измерения изменяет состояние, т. е. поворачивает

чивает вектор, представляющий состояние в векторном пространстве. Таким образом, измерение может быть представлено *оператором* в абстрактном пространстве; каждой динамической переменной соответствует определенный оператор.

Вообще измерение значения данной динамической переменной нарушает состояние данной системы, так что последующие измерения той же переменной дают другие результаты; все, что можно получить с помощью этих повторных измерений, — это среднее значение и средние отклонения или неопределенность. Только для небольшого количества из всех возможных состояний неопределенность равна нулю и каждое измерение данного количества приводит к одному и тому же значению. Если измерение этого единственного значения достаточно для задания состояния, то вектор состояния должен быть *собственным вектором* оператора, представляющего эту переменную (определенным на стр. 82). Если для задания состояния требуются значения более чем одного переменного, то вектор состояния, для которого неопределенность одного из этих переменных равна нулю, не будет обязательно собственным вектором; однако можно доказать, что совокупность собственных векторов всегда может быть найдена.

Чтобы резюмировать некоторые наши рассуждения из гл. 1, обозначим через \mathfrak{P} оператор, соответствующий импульсу системы; пусть состояния, для которых неопределенность измерения p равна нулю, изображаются векторами p_n (собственные векторы оператора \mathfrak{P}). Тогда, согласно уравнению (1.6.31), имеем

$$\mathfrak{P} \cdot p_n = p_n p_n,$$

где p_n — одно из измеренных значений импульса (мы выбираем длину вектора p_n так, чтобы p_n было измеренным значением); оно называется *собственным значением* оператора \mathfrak{P} для состояния, обозначенного через p_n . Так как p_n должно быть действительным числом, оператор \mathfrak{P} должен быть *эрмитовым* оператором, согласно определению, данному на стр. 86 (другими словами, оператор \mathfrak{P} равен своему сопряженному оператору \mathfrak{P}^*).

Если система находится в произвольном состоянии, соответствующем вектору состояния e , импульс, вообще говоря, не может быть точно измерен. Можно определить только среднее значение результатов ряда измерений. Как указано на стр. 83, вектор e может быть записан в виде суммы произведений собственных векторов p_m на соответствующие компоненты вектора e в направлениях p_m , выражаемые скалярными произведениями $p_m^* \cdot e$. В гл. 1 мы показали, что векторы p_m взаимно-перпендикулярны и нормированы так, что скалярные произведения $p_m^* \cdot e$ эквивалентны направляющим косинусам, хотя вообще и являются комплексными числами. Это значит, что сумма квадратов модулей направляющих косинусов равна единице

$$\sum_m |p_m^* \cdot e|^2 = 1, \text{ где } e = \sum_m p_m (p_m^* \cdot e).$$

Это уравнение подсказывает, что величину $|p_m^* \cdot e|^2$ можно считать вероятностью, а именно вероятностью того, что измерение величины p в состоянии e приводит к значению p_m (т. е. вероятностью того, что состояние e находится в состоянии p_m). Поэтому среднее значение p для состояния e равно

$$p_{\text{ср.}} = \sum_m p_m |p_m^* \cdot e|^2 = \left[\sum_n (e^* \cdot p_n) p_n^* \right] \cdot \mathfrak{P} \cdot \left[\sum_m (p_m (p_m^* \cdot e)) \right] = e^* \cdot \mathfrak{P} \cdot e$$

Это среднее того самого типа, который содержится в уравнении (2.6.6).

На стр. 83 мы показали, что если две динамические переменные не измеримы одновременно, то соответствующие им операторы не перестановочны, т. е. $\mathfrak{A} \cdot \mathfrak{B} \neq \mathfrak{B} \cdot \mathfrak{A}$. В этом параграфе мы затратили некоторое время на выяснение того, что данный импульс p и сопряженная ему координата q не могут быть одновременно измерены, если принять во внимание свойства физических взаимодействий, существенно обусловленных атомистичностью и наличием комбинации волна — частица. Поэтому коммутатор $[p \cdot q - q \cdot p]$ (который в дальнейшем будем обозначать через $[p, q]$) не равен нулю. Важно найти, чему он равен.

Прежде всего, $[p, q]$ должен быть чисто мнимым, так как $(e^* \cdot p \cdot q \cdot e)$ является комплексным сопряженным с $(e^* \cdot q \cdot p \cdot e)$ для любого вектора e (так как $q^* = q$ и $p^* = p$) и разность между этими двумя величинами (представляющая собой среднее значение $[p, q]$ для состояния e) должна быть поэтому чисто мнимой. Во-вторых, мы доказали на стр. 91, что величина коммутатора $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}]$ пропорциональна произведению неопределенностей $(\Delta a \Delta b)$. Комбинируя все это (а также и выводы из эксперимента), мы приходим к уравнению $[p, q] = \hbar/i$ (где $\hbar = h/2\pi$), уже полученному раньше [уравнение (1.6.32)].

Учитывая уравнение (2.6.6), связывающее квантовые неопределенностии с выражением классической скобки Пуассона, мы, наконец, приходим к *основному уравнению квантовой механики*; это уравнение устанавливает связь между двумя операторами, представляющими две динамические переменные некоторой системы, и скобкой Пуассона для соответствующих классических переменных:

$$[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}] = \mathfrak{A} \cdot \mathfrak{B} - \mathfrak{B} \cdot \mathfrak{A} = (a, b) \frac{\hbar}{i} = \frac{\hbar}{i} \left\{ \sum_m \left[\frac{\partial a}{\partial p_m} \frac{\partial b}{\partial q_m} - \frac{\partial a}{\partial q_m} \frac{\partial b}{\partial p_m} \right] \right\}; \quad (2.6.7)$$

здесь, если (a, b) не сводится к постоянной, мы должны считать эту скобку функцией операторов p_m и q_m . Нужно, однако, сделать предупреждение о том, что *порядок* выписывания множителей (qr вместо qr^2 и т. д.) для некоммутирующих операторов играет роль и что уравнение (2.6.7) выполняется только тогда, когда для написания скобки Пуассона выбран правильный порядок множителей (см. стр. 226). Это очень интересное уравнение связывает операторы квантовой механики в абстрактном векторном пространстве с чисто классическими динамическими функциями. Оно представляет собой не единственное уравнение, которое можно придумать, чтобы удовлетворить общим требованиям, намеченным на предыдущей странице, но является простейшим уравнением этого рода и его оправдание заключается в правильности вытекающих из него результатов.

Подведем итог выводов этого параграфа. В квантовой механике состояние задается значениями тех величин, которые могут быть одновременно измерены для этого состояния. Соответствующие им операторы оставляют состояние неизменным и попарно перестановочны друг с другом. Конечно, эти операторы не являются функциями друг друга. В этом можно убедиться, составив оператор, перестановочный с одним, но не перестановочный с другим. Если операторы не перестановочны, они удовлетворяют соотношению неопределенности, данному уравнением (2.6.6).

Независимые квантовые переменные и функции от операторов. Существует, конечно, много функций динамических переменных системы, которые должны превратиться в операторы. Функция одного переменного (например, p_m или q_n), которая может быть определена классическим способом с помощью ряда по степеням этого переменного, может быть очень просто преобразована таким образом, что любая такая функция,

взятая, например, от \mathfrak{p}_m , перестановочна с \mathfrak{p}_m и ее значение может быть точно найдено, если \mathfrak{p}_m может быть точно измерено. Собственное значение функции может быть подсчитано, исходя из собственного значения \mathfrak{p}_m . Наконец, если оператор \mathfrak{F} перестановчен с оператором \mathfrak{p} и если каждый оператор, перестановочный с \mathfrak{p} , перестановчен также с \mathfrak{F} , то можно сказать, что \mathfrak{F} есть функция оператора \mathfrak{p} .

Однако во многих случаях, когда два оператора перестановочны, один из них все же не является функцией другого. Так, многие системы требуют задания нескольких независимых операторов, чтобы полностью определить состояние. Операторы \mathfrak{p}_n и \mathfrak{q}_m ($n \neq m$) независимы и перестановочны, согласно равенству (2.6.7). Однако ни один из них не является функцией другого, так как можно найти много операторов, перестановочных с \mathfrak{p}_n , но не перестановочных с \mathfrak{Q}_m (например, любая функция оператора \mathfrak{p}_m). Фактически если два оператора перестановочны, но можно найти третий оператор, перестановочный с одним из них, но не перестановочный с другим, то, наверное, первые два оператора независимы друг от друга.

Если мы имеем дело с функциями двух сопряженных переменных, то с помощью уравнения (2.6.7) и пользуясь инвариантностью скобок Пуассона при преобразованиях прикосновения (т. е. при переходе от одной совокупности сопряженных переменных к любой другой полной совокупности) мы видим, что

$$[\mathfrak{F}(q_n, p_n), \mathfrak{Q}_n] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial p_n}, \quad [\mathfrak{F}(q_n, p_n), \mathfrak{P}_n] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial q_n}, \quad (2.6.8)$$

причем производные в правых частях переводятся в операторы после того, как произведено дифференцирование. Прежде чем переводить в оператор любую функцию сопряженных переменных, нужно внимательно расположить их в определенном порядке, так как эти переменные могут быть не перестановочны. (Например, классическая функция $p^2 q$ может перейти в $\mathfrak{p} \cdot \mathfrak{p} \cdot \mathfrak{q}$, или в $\mathfrak{p} \cdot \mathfrak{q} \cdot \mathfrak{p}$, или в $\mathfrak{q} \cdot \mathfrak{p} \cdot \mathfrak{p}$, а собственные векторы каждого из этих операторов различны.) Часто правильный порядок может быть найден только с помощью проб или под контролем опыта.

Предположим, например, что нужно найти квантово-механический оператор, соответствующий импульсу, сопряженному со сферическим углом $\varphi = \arctg(y/x)$. В классическом смысле — это компонента z момента количества движения, равная $xp_y - yp_x$; так как \mathfrak{x} и \mathfrak{p}_y перестановочны (так же, как \mathfrak{y} и \mathfrak{p}_x), квантово-механический оператор может быть составлен сразу в виде $\mathfrak{x}\mathfrak{p}_y - \mathfrak{y}\mathfrak{p}_x$. Легко проверить, воспользовавшись уравнениями (2.6.8), что

$$[(\mathfrak{x}\mathfrak{p}_y - \mathfrak{y}\mathfrak{p}_x), \mathfrak{G}] = \frac{\hbar}{i}. \quad (2.6.9)$$

Рассмотрим более сложный пример. Требуется найти в квантовой механике эквивалент «радиальному импульсу» p_r , сопряженному радиальной координате $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Классический радиальный импульс равен

$$p_r = p_x \cos \varphi + p_y \sin \varphi = \frac{x p_x}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \frac{y p_y}{\sqrt{x^2 + y^2}}.$$

Это выражение не имеет единственного эквивалента в квантовой механике, так как, например, \mathfrak{x} и \mathfrak{p}_x не перестановочны. Форма, для которой точно выполняется правило коммутатора, получается непосредственно из написанного выше выражения, то есть

$$\left[\frac{\mathfrak{x}}{r} \mathfrak{p}_x + \frac{\mathfrak{y}}{r} \mathfrak{p}_y, r \right] = \frac{\hbar}{i}. \quad (2.6.10)$$

Так как мы требуем, чтобы оператор был эрмитовым, то должна быть использована симметричная форма.

Собственные векторы для координат. До сих пор мы довольно подробно рассматривали правила перестановочности, которые могут быть выведены из уравнения (2.6.7). Обратимся теперь к исследованию собственных значений этих операторов. Во-первых, мы покажем, что собственные значения оператора q непрерывны. Чтобы убедиться в этом, мы покажем, что если существует собственное значение q оператора q , то может быть образован собственный вектор с собственным значением $q + dq$.

Предположим, что $e(q)$ — собственный вектор оператора q , такой, что $q \cdot e(q) = qe(q)$. На вектор $e(q)$ будем действовать оператором

$$\mathfrak{D} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathfrak{p} dq\right) = 1 - \frac{i}{\hbar} \mathfrak{p} dq.$$

Вектор $\mathfrak{D} \cdot e(q)$ является собственным вектором оператора q с собственным значением $q + dq$, так как

$$\begin{aligned} q \cdot \mathfrak{D} \cdot e(q) &= \left[q - \frac{i}{\hbar} q \mathfrak{p} dq\right] e(q) = \left[q + \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} - \mathfrak{p} q\right) dq\right] e(q) = \\ &= (q + dq) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \mathfrak{p} dq\right) e(q) = (q + dq) \mathfrak{D} \cdot e(q), \end{aligned}$$

так что

$$\mathfrak{D} \cdot e(q) = e(q + dq).$$

Для получения этого мы воспользовались коммутационным правилом $[\mathfrak{p}, q] = \hbar/i$.

Заметим, что при изучении колеблющейся струны на стр. 134 мы нашли другой случай с непрерывным распределением собственных значений.

Отметим также, что

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathfrak{p} q'\right) \cdot e(q) = e(q + q'). \quad (2.6.11)$$

На стр. 133 мы отметили возможные осложнения при рассмотрении собственных векторов для несчетного множества собственных значений. Различные собственные векторы $e(q)$ для различных значений q перпендикулярны ко всем другим собственным векторам последовательности, так что наверное $e(q)$ не является непрерывной функцией от q . Поэтому результат следующих действий

$$\left[1 - \frac{i}{\hbar} \mathfrak{p} \Delta q\right] \cdot e(q) = e(q + \Delta q)$$

или

$$\mathfrak{p} \cdot e(q) = i\hbar \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \left[\frac{e(q + \Delta q) - e(q)}{\Delta q} \right] \quad (2.6.12)$$

не обозначает, что правая часть пропорциональна производной вектора $e(q)$ по переменному q , так как разность $[e(q + \Delta q) - e(q)]$ не стремится к нулю непрерывным образом при стремлении Δq к нулю. [Отметим, что этот результат следует непосредственно из уравнения (2.6.7) и может быть написан для любой пары канонических сопряженных переменных при непрерывном распределении собственных значений для одной из переменных.]

Тот факт, что q имеет континуум значений, вызывает также некоторые трудности при решении вопроса о том, какой функцией от q и q' является скалярное произведение $\mathbf{e}^*(q) \cdot \mathbf{e}(q')$. Можно предполагать, что эта функция должна быть равна пулю для всех значений q и q' , кроме значений, для которых $q = q'$, что приводит к разрывной функции. Оказывается, что наиболее удобно определить ее с помощью интеграла. Очевидную формулу $\sum_n \mathbf{e}_m^* \cdot \mathbf{e}_n = 1$, справедливую для дискретных собственных векторов,

мы распространим на случай континуума $\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{e}^*(q) \cdot \mathbf{e}(q') dq' = 1$.

Это равенство определяет величины векторов \mathbf{e} (см. стр. 231).

Функции преобразования. Интегрируя по q , мы можем составить интегралы, содержащие $\mathbf{e}(q)$ и равные пределам сумм подинтегральных выражений для всех значений q между пределами интегрирования. Например, произвольный вектор состояния \mathbf{f} может быть выражен в виде суммы всех различных собственных векторов для q

$$\mathbf{f} = \int_{-\infty}^{\infty} f(q) \mathbf{e}(q) dq, \quad (2.6.13)$$

где $|f(q)|^2 dq$ есть вероятность того, что частица находится между q и $q + dq$, когда система имеет состояние \mathbf{f} . Величина $f(q)$, будучи пропорциональна направляющему косинусу угла между \mathbf{f} и $\mathbf{e}(q)$, является комплексным числом и представляет собой обычную функцию непрерывного переменного q . Аналогия между этим интегралом и интегралом Фурье станет более ясной, если развить это рассуждение.

Этим способом, интегрируя собственные векторы оператора положения \mathbf{q} , мы можем поставить в соответствие каждому вектору состояния \mathbf{f} обыкновенную функцию $f(q)$, которая называется *функцией преобразования*¹⁾, так как она определяет связь между \mathbf{f} и векторами $\mathbf{e}(q)$. Собственный вектор другого оператора может быть, конечно, выражен через векторы $\mathbf{e}(q)$. Например, если $\mathfrak{A} \cdot \mathbf{e}(a) = a \mathbf{e}(a)$, то можно написать

$$\mathbf{e}(a) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(a | q) \mathbf{e}(q) dq, \quad (2.6.14)$$

где $|\phi(a | q)|^2 dq$ есть вероятность того, что координата системы имеет значение, лежащее между q и $q + dq$, когда состояние системы таково, что переменное, представляемое оператором \mathfrak{A} , наверное имеет значение a . Такая функция преобразования была рассмотрена на стр. 134.

Если мы не хотим полагаться на наше умение производить вычисления с векторами состояния, мы можем всегда перейти к вычислениям над функцией $f(q)$. Например, среднее значение динамической величины, представляемой оператором \mathfrak{A} , когда система находится в состоянии \mathbf{f} , имеет вид

$$\mathbf{f}^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{f} = \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(q) [\mathbf{e}^*(q) \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{e}(q')] f(q') dq',$$

¹⁾ Функция $f(q)$ называется обычно волновой функцией в x -представлении. — Прим. ред.

так что, зная результат действия оператора на вектор $\mathbf{e}(q)$, мы можем выразить результат действия оператора на любой другой вектор состояния \mathbf{f} через функцию преобразования $f(q)$.

Например, мы можем вычислить результат действия оператора \mathfrak{p} , являющегося канонически сопряженным координатному оператору q , на произвольный вектор состояния \mathbf{f} . Пользуясь уравнением (2.6.12), имеем

$$\begin{aligned} \mathfrak{p} \cdot \mathbf{f} &= \int_{-\infty}^{\infty} f(q) \mathfrak{p} \cdot \mathbf{e}(q) dq = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \lim \left[\frac{\mathbf{e}(q + \Delta q) - \mathbf{e}(q)}{\Delta q} \right] f(q) dq = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \lim \left[\frac{f(q) - f(q - \Delta q)}{\Delta q} \right] \mathbf{e}(q) dq = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(q)}{\partial q} \right] \mathbf{e}(q) dq. \end{aligned} \quad (2.6.15)$$

Другими словами, результат действия оператора \mathfrak{p} на вектор состояния \mathbf{f} соответствует результату действия аналитической операции $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ на функцию преобразования $f(q)$. Так как $f(q)$ — обыкновенная функция, дифференциальный оператор имеет обычный смысл. Повторяя эти рассуждения, найдем, что оператору $b(\mathfrak{p})^n$ соответствует оператор $b(\hbar/i)^n (\partial^n/\partial q^n)$, действующий на $f(q)$. Таким образом, если функцию $\mathcal{F}(\mathfrak{p})$ оператора \mathfrak{p} можно разложить в степенной ряд, то соответствующий оператор, действующий на функцию $f(q)$, получается подстановкой вместо \mathfrak{p} дифференциального оператора $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$.

Было бы нетрудно с помощью уравнений (2.6.5) и (2.6.7) обобщить эти замечания. Рассмотрим полную совокупность координат q_m ($m = 1, \dots, n$), с помощью которой можно задавать конфигурацию данной системы (в классическом смысле). Найдем имульсные переменные p_m , сопряженные с q так, чтобы удовлетворялись уравнения (2.6.5), содержащие скобки Пуассона. Каждое динамическое переменное $B(p, q)$ системы может быть выражено через p и q . Квантово-механический оператор \mathfrak{B} , соответствующий классической величине B , может быть получен, если подставить в B операторы \mathfrak{p}_m и q_m вместо величин p_m и q_m . Этот оператор, действуя на абстрактный вектор \mathbf{f} , представляющий состояние системы, изменяет его величину и (или) направление. Если вместо исследования действия оператора $\mathfrak{B}(\mathfrak{p}, q)$ на \mathbf{f} мы предпочтем изучить соответствующее влияние на функцию преобразования $f(q_1, q_2, \dots, q_n)$, то мы можем воспользоваться следующим обобщением уравнения (2.6.15):

$$\mathfrak{B}(\mathfrak{p}, q) \mathbf{f} = \int \cdots \int \mathcal{B} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) f(q_1, \dots, q_n) dq_1 \dots dq_n \mathbf{e}(q_1, \dots, q_n) \quad (2.6.16)$$

Здесь дифференциальный оператор \mathcal{B} под знаком интеграла, действующий на функцию преобразования $f(q_1, \dots, q_n)$, образован заменой каждого p_m в классической функции $B(p, q)$ через $(\hbar/i)(\partial/\partial q_m)$. И в \mathfrak{B} , и в соответствующем дифференциальному операторе, действующем на $f(q)$, мы должны быть внимательны к порядку множителей p и q в каждом члене B , ибо сопряженные операторы \mathfrak{p}_m и q_m не перестановочны, что видно из уравнений

$$[\mathfrak{p}_m, q_n] = \frac{\hbar}{i} \delta_{mn}; \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n, \end{cases}$$

$$[\mathfrak{p}_m, \mathfrak{p}_n] = 0 = [q_m, q_n],$$

которые соответствуют уравнениям (2.6.5), содержащим скобки Пуассона. Как было определено раньше, $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}]$ обозначает коммутатор $(\mathfrak{A} \cdot \mathfrak{B} - \mathfrak{B} \cdot \mathfrak{A})$.

Операторные уравнения для функций преобразования. Например, вместо применения векторного уравнения

$$\mathfrak{B}(\mathfrak{p}, q) \cdot \mathbf{b}_m = b_m \mathbf{b}_m$$

для определения собственных векторов \mathbf{b}_m и собственных значений b_m можно воспользоваться соответствующим дифференциальным уравнением

$$\mathcal{B}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \psi(b_m | q) = b_m \psi(b_m | q) \quad (2.6.17)$$

для нахождения функций преобразования $\psi(b_m | q)$ и их собственных значений b_m для оператора \mathcal{B} . Собственные векторы \mathbf{b}_m (если в них есть потребность) могут быть найдены с помощью формул

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_m &= \int \dots \int \phi(b_m | q) \mathbf{e}(q) dq_1 \dots dq_n, \\ \mathbf{b}_m^* &= \int \dots \int \bar{\phi}(b_m | q) \mathbf{e}^*(q) dq_1 \dots dq_n. \end{aligned} \quad (2.6.18)$$

Вероятность того, что конфигурация системы определяется значениями координат, лежащими между q_1 и $q_1 + dq_1, \dots, q_n$ и $q_n + dq_n$, когда B имеет значение b_m , равна $|\psi(b_m | q)|^2 dq_1 \dots dq_n$, а среднее значение динамической переменной $A(p, q)$, когда B имеет значение b_m , равно

$$(\mathbf{b}_m^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{b}_m) = \int \dots \int \bar{\phi}(b_m | q) \mathcal{A}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \phi(b_m | q) dq_1 \dots dq_n. \quad (2.6.19)$$

Так как совокупность собственных векторов \mathbf{b}_n может быть также использована для разложения произвольного вектора состояния, мы имеем аналогично

$$\mathfrak{A} \cdot \mathbf{b}_m = \sum_s (\mathbf{b}_s^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{b}_m) \mathbf{b}_s,$$

$$(\mathbf{b}_s^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{b}_m) = \int \dots \int \bar{\phi}(b_s | q) \mathcal{A}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \phi(b_m | q) dq_1 \dots dq_n, \quad (2.6.20)$$

так как

$$(\mathbf{b}_s^* \cdot \mathbf{b}_m) = \delta_{sm}; \quad \delta_{sm} = \begin{cases} 0, & s \neq m, \\ 1, & s = m. \end{cases}$$

Таким образом, многие операции алгебры векторов состояний проходят параллельно интегральным и дифференциальным операциям, совершающимся над функциями преобразования. К настоящему моменту должно быть ясно, что эти функции преобразования некоторым образом связаны с волновыми функциями, рассмотренными довольно смутно в начале этого параграфа. Квадраты их величин связывают между собой вероятность того, что система имеет данную конфигурацию (например, что частица находится в данной точке), и вероятность того, что система находится в данном состоянии, характеризуемым собственным значением b_m . Эти функции характерны для нового анализа квантовых явлений; они соответствуют тем типам фактов, которые можно надеяться найти для динамической системы, взамен точных данных о траекториях, интересующих нас в классической динамике. Конечно, если содержащиеся здесь энергии и импульсы настолько велики, что соответствующие период $1/\nu$ и длина волны, определенные формулами (2.6.1), намного меньше, чем промежутки времени и расстояния, связанные с системой, то эти функции преобразования сжимаются к лучам, близко соответствующим траекториям классической динамики; допустимые состояния системы близко соответствуют при этом различным, возможным в классической механике начальным условиям.

Преобразование к пространству импульсов. До сих пор мы выражали наши векторы состояния через основную систему векторов $\mathbf{e}(q)$ для непрерывно изменяющихся координат q_1, \dots, q_n системы. Тем не менее все можно выразить также и через сопряженные импульсы p_1, \dots, p_n , так как между величинами p и q имеется симметрия в выражениях классических скобок Пуассона и квантового коммутатора. Мы получаем совокупность собственных векторов $\mathbf{e}(p)$ для всего несчетного множества допустимых значений импульсов p_1, \dots, p_n , и всякий другой вектор состояния можно выразить через интеграл

$$\mathbf{b}_m = \int \dots \int \psi(b_m | p) \mathbf{e}(p) dp_1 \dots dp_n, \quad (2.6.24)$$

аналогичный интегралам (2.6.18).

Воспользовавшись коммутационными соотношениями операторов \mathfrak{p} и q , мы можем показать, что действие оператора q на вектор состояния \mathbf{b}_m соответствует действию операции $-(\hbar/i)(\partial/\partial p)$ на функцию преобразования $\psi(b_m | p)$. Уравнения, соответствующие равенствам (2.6.17) и (2.6.20), имеют вид

$$\mathcal{B}\left(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(b_m | p) = b_m \psi(b_m | p)$$

и

$$(\mathbf{b}_s^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{b}_m) = \int \dots \int \bar{\psi}(b_s | p) \mathcal{A}\left(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(b_m | p) dp_1 \dots dp_n.$$

Величина $|\psi(b_m | p)|^2 dp_1 \dots dp_n$ является, само собой разумеется, вероятностью того, что система попадает в элемент импульсов $dp_1 \dots dp_n$, если ее состояние дается величиной b_m .

Для того чтобы дополнить это описание, мы нуждаемся в знании соотношений между собственными векторами $\mathbf{e}(q)$ для координат и собственными векторами $\mathbf{e}(p)$ для импульсов. Эти соотношения можно было бы также использовать для преобразования функции $\psi(b_m | q)$ в функцию $\phi(b_m | p)$ и обратно. Как и раньше, имеем:

$$\mathbf{e}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p | q) \mathbf{e}(q) dq, \quad (2.6.22)$$

где мы для простоты рассматриваем только одну координату и один сопряженный импульс. Функция преобразования $\psi(p | q)$ связывает состояние, в котором мы точно знаем положение частицы (и не имеем сведений об импульсе), с состоянием, в котором мы точно знаем импульс частицы, но не имеем сведений об ее положении (это последнее соответствует нашим знаниям о частице, находящейся слева от экрана на рис. 2.26 и 2.27). Чтобы найти $\psi(p | q)$, мы воспользуемся уравнением $\mathfrak{p}\psi(p) = p\psi(p)$ для собственного вектора оператора \mathfrak{p} и преобразуем его, опираясь на уравнения (2.6.22) и (2.6.15)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \psi(p | q) - p\psi(p | q) \right] \mathbf{e}(q) dq = 0,$$

для всех значений p и q . Таким образом, $\psi(p | q)$ равна $c \exp[(i/\hbar)pq]$, где c — нормирующая постоянная.

Функция «нормируется» так (см. стр. 228), чтобы выполнялось равенство $\mathbf{e}^*(p) \cdot \mathbf{e}(p') = \delta(p - p')$, где δ — дельта-функция Дирака, опре-

деляемая уравнениями (см. также стр. 122)

$$\delta(x) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \begin{cases} 0, & x < -\frac{1}{2}\Delta, \\ 1/\Delta, & -\frac{1}{2}\Delta < x < \frac{1}{2}\Delta, \\ & \int_{-\infty}^{\infty} f(z) \delta(x-z) dz = f(x), \\ 0, & \frac{1}{2}\Delta < x. \end{cases} \quad (2.6.23)$$

Выразим сначала $e^*(p)$ и $e(p')$ через векторы $e(q)$

$$e^*(p) \cdot e(p') = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} dq' e^{-(i/h)pq + (i/h)p'q'} [e^*(q) \cdot e(q')] = \delta(p - p').$$

Но $[e^*(q) \cdot e(q')] = \delta(q - q')$, так что интегрирование по q' дает

$$\delta(p - p') = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{(i/h)(p' - p)q}.$$

Этот последний интеграл не будет вполне сходящимся, но и дельта-функция также не является функцией, ведущей себя хорошо. Лучше было бы воспользоваться определением функции $\delta(p - p')$ и проинтегрировать обе части приведенного выше уравнения по p' в промежутке от $p - \frac{1}{2}\Delta$ до $p + \frac{1}{2}\Delta$ (было бы, может быть, надежнее, если бы мы интегрировали сначала по p' , а потом по q' , чем в обратном порядке, но результат будет один и тот же)

$$\begin{aligned} \int_{p - \frac{1}{2}\Delta}^{p + \frac{1}{2}\Delta} \delta(p - p') dp' &= 1 = c^2 \int_{-\frac{1}{2}\Delta}^{\frac{1}{2}\Delta} dz \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{(i/h)zq} = \\ &= 2c^2 h \int_{-\infty}^{\infty} \sin(q\Delta/2h) (dq/q) = c^2 \cdot 2\pi h. \end{aligned}$$

Следовательно, $c = 1/\sqrt{2\pi h} = 1/\sqrt{h}$ и $\psi(p|q) = [1/\sqrt{2\pi h}] e^{(i/h)pq}$. Поэтому функции преобразования $f(q)$ и $f(p)$ ¹⁾ для вектора состояния \mathbf{f} связаны следующими уравнениями:

$$f(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{-\infty}^{\infty} f(q) e^{-(i/h)pq} dq$$

и

$$f(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{-\infty}^{\infty} f(p) e^{(i/h)pq} dp = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dq' f(q') e^{(2\pi i/h)(q-q')p}. \quad (2.6.24)$$

Это последнее уравнение встречалось раньше (см. уравнение 2.1.25) и будет очень подробно рассмотрено в гл. 4. Правая часть его является одной из форм интеграла Фурье.

¹⁾ Функция $f(p)$ называется обычно волновой функцией в p -представлении (ср. с примечанием на стр. 228). — Прим. ред.

Заслуживает упоминания физическое истолкование координатно-импульсной функции преобразования. Так как $|\psi(p|q)|^2$ является постоянной, то вероятность $|\psi(p|q)|^2 dq$ того, что частица, имеющая импульс p , находится между точками q и $q+dq$, не зависит от q , а вероятность $|\psi(p|q)|^2 dp$ того, что частица, находящаяся в точке q , имеет импульс, заключенный между p и $p+dp$, не зависит от p . Это является естественным следствием из соотношения неопределенности Гейзенберга, которое утверждает, что если p известно точно ($\Delta p \rightarrow 0$), то частица с одинаковой вероятностью может находиться где угодно ($\Delta q \rightarrow \infty$), и наоборот.

Заметим, во-вторых, что $e^{(i/h)pq}$, рассматриваемая как функция координаты q , могла быть множителем, зависящим от координаты, для проходящей плоской волны $\exp[(2\pi i/h)p(q-ut)]$ длины h/p и частоты ip/h , распространяющейся с некоторой скоростью u . Мы еще не изучили зависимость векторов состояния и функций преобразования от времени, но легко видеть, что соотношение $\lambda = (h/p)$ является таким, которое мы рассмотрели [см. уравнение (2.6.1)], когда начали говорить о волнах и частицах. Рассматривая это соотношение, мы должны ожидать, что величина $(h \times \text{частота}) = ip$ будет соответствовать энергии частицы, хотя мы пока еще не в состоянии определить скорость распространения волн u .

Появление функции преобразования, связывающей состояние, в котором частица имеет импульс p , с ее положением q , имеет существенную связь с нашим предварительным рассмотрением волн и частиц. Для состояния, в котором частица может иметь либо импульс p , либо импульс p' , собственный вектор имеет вид $\frac{1}{2} \sqrt{2} [\mathbf{e}(p) + e^{i\varphi} \mathbf{e}(p')]$, а функция преобразования будет равна

$$\psi(p, q) = \frac{1}{\sqrt{2h}} [e^{(2\pi i/h)pq} + e^{(2\pi i/h)p'q+i\varphi}]$$

и представляет собой пространственную часть двух линейно наложенных друг на друга волн с различными длинами. Сюда включена произвольная разность фаз φ , значение которой можно определить при более точном задании состояния. Вероятность $|\psi|^2 dq$ нахождения частицы между q и $q+dq$ на этот раз не будет везде одной и той же, так как две части волны интерферируют, создавая узлы и пучности на протяжении волны. Так как мы теперь не уверены относительно импульсов, то можем уточнить положение частицы в пространстве.

Для состояния f , соответствующего широкому интервалу импульсов, как показано в уравнении (2.6.24), интерференция отдельных волн может быть такова, что $f(q)$ велико только вблизи q_0 (т. е. наиболее вероятное положение частицы — положение вблизи q_0) и состояние может быть таким, в котором положение частицы достаточно точно известно.

Функция Гамильтона и уравнение Шредингера. Одной из наиболее общих «постоянных движения» в классической динамике является полная энергия системы; действительно, она постоянна для всякой консервативной системы. Классическое исследование динамики таких систем, проведенное Гамильтоном, основано на применении «функции Гамильтона» $H(p, q)$ (см. стр. 270), которая равна полной энергии системы, кинетической плюс потенциальной, выраженной через координаты и сопряженные импульсы (в то время как функция L Лагранжа обычно равна разности между кинетической и потенциальной энергиями, функция Гамильтона H равна их сумме). Уравнения, связывающие скорость изменения во времени координат q_m с импульсами, имеют вид

$$\dot{q}_m = \frac{dq_m}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_m}, \quad (2.6.25)$$

что соответствует уравнениям (2.6.3). Уравнения движения, связывающие ускорения с силами, имеют тогда вид

$$\dot{p}_m = \frac{dp_m}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_m}. \quad (2.6.26)$$

Эти уравнения подробнее будут рассмотрены в гл. 3.

В квантовой механике вектор состояния $e(E)$ данной системы, имеющей определенную энергию E [$e(E)$, является собственным вектором, соответствующим собственному значению E энергии], может быть определен из уравнения

$$\mathfrak{H}(p, q) \cdot e(E) = Ee(E), \quad (2.6.27)$$

где оператор \mathfrak{H} получается из классической функции Гамильтона посредством замены величин p_m и q_m соответствующими операторами. Правильный порядок операторов в различных членах не определяется полностью классической функцией $H(p, q)$, однако этот порядок обычно может быть установлен с помощью проб, как указано на стр. 226.

Конечно, нельзя и думать решить уравнение, содержащее абстрактные операторы и векторы состояния. Может оказаться легче решить соответствующее дифференциальное уравнение для функции преобразования $\psi(E|q)$, квадрат модуля которой измеряет плотность вероятности различных конфигураций системы, если мы знаем, что энергия равна E . Принимая во внимание уравнение (2.6.17), мы видим, что искомое уравнение имеет вид

$$\mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \psi(E|q) = E\psi(E|q), \quad (2.6.28)$$

где каждое p_m в выражении H заменено на операцию $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$, действующую на $\psi(E|q)$. Это уравнение называется *уравнением Шредингера* для системы.

Уравнение Шредингера часто оказывается имеющим общий вид уравнения Гельмгольца (2.1.10), которое получается, когда из волнового уравнения выделена зависимость от времени. Чтобы яснее показать это, построим уравнение Шредингера для частицы, имеющей массу m и находящейся под действием поля с потенциалом V (сила $= -\text{grad } V$). Соответствующими координатами q являются декартовы координаты x, y, z . Кинетическая энергия равна $\frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = T$, а кинетический потенциал $L = T - V$. Импульс p_x в соответствии с уравнением (2.6.3) равен $\partial L / \partial \dot{x} = m\dot{x}$ и т. д. Выражая T и V через p и q , мы в конце концов получим классическую функцию Гамильтона

$$H(p, q) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z).$$

Уравнение Шредингера получается подстановкой вместо суммы квадратов импульсов произведения $-(\hbar^2)$ на сумму производных второго порядка (лапласиан):

$$\left[-\mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) + E \right] \psi(E|q) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E - V \right] \psi(E|x, y, z) = 0$$

или

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x, y, z)] \psi = 0.$$

В областях, где $E > V$, ψ — осциллирующаяся функция; в областях, где $E < V$, решение изображается показательной функцией и будет либо убывать, либо безгранично возрастать по своей величине. Это следует сравнить с уравнением (2.1.10).

Мы можем, конечно, составить аналогичное уравнение для функции преобразования от E к импульсу p . Для этого в $H(p, q)$ вместо каждого q нужно подставить дифференциальный оператор $-(\hbar/i)(\partial/\partial p)$. Иногда это сделать труднее, так как V часто является более сложной функцией переменных q , чем T — переменных p [как, например, истолковать оператор, образованный из $1/\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, когда мы заменим x через $-(\hbar/i)(\partial/\partial p_x)$ и т. д.?]. Можно, конечно, сначала определить $\psi(E|q)$, а $\psi(E|p)$ найти с помощью преобразования Фурье, данного в уравнении (2.6.24). Более прямой путь, который можно продемонстрировать на уравнении Гамильтона для одной частицы, заключается в следующем:

$$H = T(p) + V(q); \quad T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2); \quad q = x, y, z.$$

Операция, соответствующая кинетической энергии, имеет выражение

$$\mathfrak{E}e(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi(E|p) dp_x dp_y dp_z e(p).$$

Для потенциальной энергии мы можем применить второе преобразование к векторам $e(p)$

$$\mathfrak{B} \cdot e(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{B} \cdot e(p') \psi(E|p') dp'_x dp'_y dp'_z$$

и на основании уравнения (2.6.20)

$$\mathfrak{B} \cdot e(p') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [e^*(p) \cdot \mathfrak{B} \cdot e(p')] e(p) dp_x dp_y dp_z,$$

где

$$\begin{aligned} [e^*(p) \mathfrak{B} \cdot e(p')] &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(p|q) V(q) \psi(p'|q) dx dy dz = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z) e^{(i/\hbar)[x(p'_x - p_x) + y(p'_y - p_y) + z(p'_z - p_z)]} dx dy dz = V_{pp'}. \end{aligned}$$

Поэтому вместо дифференциального уравнения для $\psi(E|p)$ мы имеем интегральное уравнение

$$(1/2m)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi(E|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V_{pp'} \psi(E|p') dp'_x dp'_y dp'_z = E \psi(E|p),$$

которое, конечно, полностью эквивалентно уравнению

$$\mathcal{H}\left(p, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) \psi(E|p) = E \psi(E|p).$$

Какое из двух уравнений легче решить, зависит от вида функции H . Если V может быть разложено на простые многочлены относительно q ,

то, по-видимому, проще решать дифференциальное уравнение; в противном случае предпочтительнее интегральное уравнение.

Гармонический осциллятор. Для иллюстрации приведенных общих принципов будет полезно рассмотреть квантовую механику одномерного гармонического осциллятора.

Сначала составим оператор, соответствующий функции Гамильтона H . Для частицы с массой m на пружине с постоянной жесткостью K функция Гамильтона выражается равенством

$$H(p, q) = (1/2m)p^2 + \frac{1}{2}Kq^2,$$

так что уравнение для собственного вектора оператора энергии имеет вид

$$\hat{H} \cdot \mathbf{e} = \left[(\mathbf{p}^2/2m) + \frac{1}{2}Kq^2 \right] \mathbf{e}(E) = E \mathbf{e}(E). \quad (2.6.29)$$

Мы, конечно, могли бы составить соответствующее уравнение Шредингера

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \left(E - \frac{1}{2}Kq^2 \right) \right] \psi(E|q) = 0$$

и решить его относительно ψ методом, который будет изложен в этой книге позже. Однако в настоящее время будет более поучительным найти сразу $\mathbf{e}(E)$.

Отметим, что классическая функция Гамильтона может быть разложена на множители

$$H = \frac{m}{2} \left(\frac{p}{m} - i\omega q \right) \left(\frac{p}{m} + i\omega q \right); \quad \omega^2 = \frac{K}{m}.$$

Квантово-механический оператор не может быть так легко разложен на множители, но, следя за порядком p и q и пользуясь коммутационным соотношением $p \cdot q - q \cdot p = \hbar/i$, получим

$$\frac{1}{2} m \mathcal{G}_- \cdot \mathcal{G}_+ = \hat{H} + \frac{1}{2} \hbar\omega; \quad \frac{1}{2} m \mathcal{G}_+ \cdot \mathcal{G}_- = \hat{H} - \frac{1}{2} \hbar\omega,$$

где

$$\mathcal{G}_+ = (\mathbf{p}/m) + i\omega q \quad \text{и} \quad \mathcal{G}_- = (\mathbf{p}/m) - i\omega q = \mathcal{G}_+^*.$$

Умножив еще раз на $[(\mathbf{p}/m) \pm i\omega q]$ и преобразовав результаты, получим

$$\hat{H} \cdot \mathcal{G}_+ = \mathcal{G}_+ \cdot [\hat{H} + \hbar\omega]; \quad \hat{H} \cdot \mathcal{G}_- = \mathcal{G}_- \cdot [\hat{H} - \hbar\omega]. \quad (2.6.30)$$

Эти уравнения показывают, что если имеется собственный вектор $\mathbf{e}(E)$ оператора \hat{H} с собственным значением E , то вектор $\mathcal{G}_+ \cdot \mathbf{e}(E)$ является также собственным вектором оператора \hat{H} с собственным значением $(E + \hbar\omega)$ [т. е. равен $A\mathbf{e}(E + \hbar\omega)$, где A — некоторая нормирующая постоянная], а вектор $\mathcal{G}_- \cdot \mathbf{e}(E)$ будет также собственным вектором для \hat{H} с собственным значением $(E - \hbar\omega)$ [т. е. равен $B\mathbf{e}(E - \hbar\omega)$]. Это означает, что при наличии одного собственного значения E оператора \hat{H} существует также бесконечная последовательность собственных значений $(E + n\hbar\omega)$, где n — любое целое положительное или отрицательное число.

Этот результат является довольно неожиданным, так как в классической механике мы не могли ожидать возможности отрицательных значений энергии. Более тщательное изучение уравнений (2.6.30) и связанных с ними утверждений показывает, что мы можем избавиться от неприятных отрицательных энергий, если значение E выберем осторожно.

Дело в том, что мы должны были сказать, что вектор $\mathfrak{G}_+ \cdot \mathbf{e}(E)$ является собственным вектором с собственным значением $(E - \hbar\omega)$, если только *сектор $\mathfrak{G}_+ \cdot \mathbf{e}(E)$ не равен нулю*. Поэтому, если мы не должны допускать значения энергии меньшие, чем некоторое минимальное значение E_{\min} , мы должны иметь

$$\mathfrak{G}_+ \cdot \mathbf{e}(E_{\min}) = 0$$

или

$$0 = \mathfrak{G}_+ \cdot \mathfrak{G}_- \cdot \mathbf{e}(E_{\min}) = \left(\mathfrak{H} - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \cdot \mathbf{e}(E_{\min}) = \left(E_{\min} - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \mathbf{e}(E_{\min}).$$

В действительности такой выбор является не просто более удобным; только такой выбор имеет физический смысл. В самом деле, если бы допустили отрицательное собственное значение для энергии, квадрат соответствующего собственного вектора $\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{e}$ должен был бы быть *отрицательным*. Так как отрицательные вероятности не имеют смысла, то допустимым является *только* указанный выше выбор.

Следовательно, наименьшее собственное значение энергии равно $\frac{1}{2} \hbar\omega$ и последовательность допустимых значений энергии дается равенством

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots;$$

различные собственные векторы могут все быть выражены через наименьший $\mathbf{e}_0 = \mathbf{e}(E_{\min})$, где $\mathfrak{H} \cdot \mathbf{e}_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \mathbf{e}_0$.

Мы должны теперь нормировать собственные векторы так, чтобы было $\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{e} = 1$. Предположим, что $\mathbf{e}_0^* \cdot \mathbf{e}_0 = 1$. Ближайший вектор $\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}(E_{\min} + \hbar\omega) = A_1 \mathfrak{G}_+ \cdot \mathbf{e}_0$. Для определения A_1 полагаем

$$1 = \mathbf{e}_1^* \cdot \mathbf{e}_1 = |A_1|^2 \mathbf{e}_0^* \mathfrak{G}_- \cdot \mathfrak{G}_+ \mathbf{e}_0 = \frac{2}{m} |A_1|^2 \mathbf{e}_0^* \left(\mathfrak{H} + \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \mathbf{e}_0 = \frac{2\hbar\omega}{m} |A_1|^2.$$

Поэтому $\mathbf{e}_1 = i(m/2\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} \mathfrak{G}_+ \cdot \mathbf{e}_0$, где $\mathfrak{H} \cdot \mathbf{e}_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega \mathbf{e}_1$.

Продолжая рассуждать так же и дальше, мы покажем, что

$$\mathbf{e}_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[i \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} \mathfrak{G}_+ \right]^n \cdot \mathbf{e}_0, \quad \text{где } \mathfrak{H} \cdot \mathbf{e}_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \mathbf{e}_n. \quad (2.6.31)$$

Таким образом, мы решили задачу определения собственных значений и собственных векторов этого оператора Гамильтона. Средние значения других функций от операторов \mathfrak{p} и \mathfrak{q} могут быть определены с помощью операторов \mathfrak{G} .

Уравнение для наименьшей функции преобразования может быть получено заменой уравнения $\mathfrak{G}_- \cdot \mathbf{e}_0 = 0$ дифференциальным уравнением для $\psi_0(q)$

$$\frac{\hbar}{im} \frac{d\psi_0}{dq} - i\omega q \psi_0 = 0,$$

которое имеет решение

$$\psi_0 = \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right]^{1/4} e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2 dq = 1.$$

Дифференциальный оператор, соответствующий оператору \mathfrak{G}_+ , имеет вид

$$G_+ = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \left[\frac{d}{dx} - x \right].$$

Воспользовавшись уравнением (2.6.31) и переведя его в уравнение для n -й волновой функции, имеем

$$\psi_n = \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar^4 n(n!)^2} \right]^{1/4} \left[\frac{d}{dx} - x \right]^n e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2 dq = 1, \quad q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} x.$$

Таким образом, мы без особых трудностей получили выражения для различных волновых функций.

Этот пример, возможно, показал, что прямые действия с операторами и собственными функциями в конце концов не трудны, а в некоторых случаях эти действия могут быть даже легче, чем вычисление сначала волновых функций.

Кстати, соотношение неопределенности может подсказать нам, что наше состояние минимальной энергии не может иметь места при нулевой энергии, так как при энергии, равной нулю, обе величины, p и q , были бы равны нулю; но в силу соотношения неопределенности невозможно одновременно знать точные значения p и q . Наименьшее количество энергии должно быть настолько большим нуля, чтобы произведение возможного изменения q на амплитуду колебания p было не меньше чем \hbar . Подставив необходимые значения, мы увидим, что минимум энергии не может быть меньше чем $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

Зависимость от времени. Чтобы дополнить наше рассмотрение квантовой механики, теперь необходимо ввести переменную времени t , что позволит развить кинематику, а в конце и динамику, так что мы сможем формулировать уравнения движения в квантовой механике.

В классической механике время появляется двумя существенно различными путями. В случае консервативных полей время является только неявной переменной, т. е. употребляется как *параметр*, с помощью которого может быть описано движение. В самом деле, в случае двух или трех измерений время может быть полностью исключено, и движение может быть описано заданием траектории. Пространственные координаты и временная координата играют не одинаковые роли. Тем не менее в релятивистской механике время и пространство входят в теорию на равных правах, так как при преобразовании Лоренца пространство и время могут перемещиваться. Поэтому в настоящей релятивистской теории переменная времени должна истолковываться совершенно иначе, чем в нерелятивистской теории. Это различие сохраняется, когда мы переходим к квантовой механике.

Время также появляется и как явная переменная, если силовое поле неконсервативно, или если силовое поле меняется с течением времени (например, поле, вызванное другой движущейся системой), или, наконец, при формулировке начальных условий. Во всех этих случаях временная переменная нужна для описания силового поля, действующего на систему, так что временная координата и пространственные координаты употребляются аналогичным образом.

Это раздвоение появляется также и в квантовой механике. Например, в соответствии с $\Delta p_x \Delta x \approx \hbar$ имеет место соотношение неопределенности

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar, \tag{2.6.32}$$

где ΔE измеряет неопределенность энергии, а Δt — неопределенность во вре-

мени. Подобного соотношения можно было бы ожидать на основе релятивистских требований; в самом деле, здесь в точности повторяется рассуждение Де Бройля, употребленное им, когда он открыл соотношение $\lambda = h/p$ из $v = E/h$. По аналогии с нашим выводом уравнения коммутатора $[\psi_x, \varepsilon] = \hbar/i$ из соотношения неопределенности (2.6.2) можно было бы попытаться из уравнения (2.6.32) получить коммутатор между оператором, соответствующим энергии, и оператором, соответствующим времени. Но это рассуждение не было бы точным, так как соотношение неопределенности (2.6.32) применимо только тогда, когда время входит как явная переменная.

Иначе говоря, когда время не входит явно в описание силового поля, то время на самом деле является параметром. Измерение его наблюдателем (например, с помощью наблюдения за часами) никак не отражается на рассматриваемой системе. Это измерение не может повлиять, например, на энергию такой системы. Но если время явно содержится в описании силового поля, то неопределенность во времени влечет за собой неопределенность силы, а следовательно, и энергии.

В распространенном примере связи между ΔE и Δt рассматривается измерение времени движения между двумя точками 1 и 2 с помощью волны, например световой волны. Использование волны, частота (а следовательно, и энергия) которой точно известна, потребовало бы бесконечной протяженности волны. Время движения было бы поэтому полностью неизвестным ($\Delta t \rightarrow \infty$, $\Delta E \rightarrow 0$). Точность измерения времени движения возрастает, если воспользоваться заслонкой, помещенной в точке 1, которая в некоторый момент, скажем при $t=0$, открывается, и второй заслонкой (в действительности применяются зеркала), помещенной в точке 2, которая должна открыться через некоторое время. Легко видеть, что измеренная скорость есть скорость волнового пакета ширины во времени, равной Δt , где Δt промежуток времени между действием двух заслонок. Однако такой волновой пакет должен состоять из наложенных друг на друга волн с различными частотами (интеграл Фурье). Эти частоты размазаны в интервале, примерно равном $1/\Delta t$, так что $\Delta E \Delta t \approx 1$ или $\Delta E \Delta t \approx \hbar$. Ясно, что функция Гамильтона, описывающая этот опыт, зависит от времени; временная переменная требуется для описания взаимодействия между материей (заслонки) и излучением. Характерно, что зависимость от времени обусловлена тем фактом, что все взаимодействующие системы (например, оператор заслонки) не включены в рассмотрение.

Резюмируя, мы видим, что соотношение неопределенности (2.6.32) применяется только тогда, когда функция Гамильтона явно зависит от времени. Если зависимость от времени неявная, это соотношение не применимо, и само время может рассматриваться как параметр. Это янусоподобное поведение отражается в том факте, что вывод уравнения Шредингера, зависящего от времени, может различаться в зависимости от обстоятельств. К счастью для релятивистских обобщений квантовой механики можно найти единый вывод, пригодный в обоих случаях.

Время как параметр. В интересах простоты и ясности лучше рассмотреть нерелятивистский случай с консервативными полями, т. е. те случаи, когда классическая нерелятивистская функция Гамильтона не зависит от времени, так что временная переменная может быть принята за параметр. В гл. 1 (стр. 88) мы уже показали, что изменение с течением времени направления вектора состояния может быть получено с помощью унитарного оператора. Мы показали там, что

$$e^{-(i/\hbar) \hat{S}t'} \cdot \mathbf{e}(t) = \mathbf{e}(t + t'),$$

где оператор \hat{Q} пока не определен. В самом деле, при построении кинематики выбор \hat{Q} будет одним из решающих шагов. Здесь мы написали $-(\hat{Q}/\hbar)$ вместо \hat{Q} для того, чтобы согласовать это уравнение с уравнением (2.6.11), связывающим \mathbf{p} и \mathbf{q} . В гл. 1 мы также показали, что

$$\hat{Q} \cdot \mathbf{e} = i\hbar \frac{d\mathbf{e}}{dt}, \quad (2.6.33)$$

где мы также ввели дополнительный множитель $-(1/\hbar)$. Это уравнение аналогично уравнению (2.6.12) для результата действия оператора \mathbf{p} на вектор $\mathbf{e}(q)$. Но имеется существенное различие, позволяющее нам написать здесь $d\mathbf{e}/dt$, в то время как такой предельный переход в (2.6.12) был недопустим. В уравнении (2.6.12), дающем результат действия оператора \mathbf{p} , мы имеем дело с собственными векторами $\mathbf{e}(q)$ оператора \mathbf{q} , так что каждый $\mathbf{e}(q)$ перпендикулярен к другим, и это не давало возможности взять предел. В настоящем случае t — только *параметр*; \mathbf{e} не является его собственным вектором, так как t не является оператором. Все собственные векторы системы с оператором \hat{Q} являются *непрерывными* функциями параметра t и врачаются в абстрактном пространстве при возрастании t . Следовательно, мы здесь можем говорить о производной вектора \mathbf{e} по t . Оператор $(\hat{Q}/i\hbar) dt$ вызывает бесконечно малое вращение вектора от его направления в момент t до его направления в момент $t + dt$, и это различие направлений непрерывно уменьшается, когда dt стремится к нулю.

Кинематика в классической механике занимается изменениями с течением времени переменных, определяющих положение, таких, как, например, q . Для того чтобы иметь возможность получить необходимые аналогии в квантовой механике и таким образом определить \hat{Q} , нам нужно рассмотреть изменение операторов с течением времени. В нашем изложении квантовой механики в этой главе до сих пор предполагалось, что оператор не зависит от времени, поскольку он действует на свои собственные векторы, так что уравнение $\hat{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f} = f \mathbf{f}$ дает то же самое собственное значение f для всех значений времени (пока $\hat{\mathbf{f}}$ явно не зависит от t).

Во многих случаях *вектор состояния* сам меняется с течением времени таким способом, как мы сейчас рассматривали. Однако мы можем также предполагать, что вектор состояния не зависит от времени, и возложить ответственность за все изменения с течением времени на оператор. Эта формальная замена, конечно, не должна влиять на измеряемые величины, такие, например, как собственные значения f или коэффициенты разложения, определенные в уравнении (2.6.20). Другими словами, оператор $\mathfrak{A}(t)$, содержащий время как параметр, может быть получен из постоянного оператора $\mathfrak{A}(0)$ с помощью уравнения (2.6.33) и требования, чтобы величина

$$\mathbf{f}^*(t) \cdot \mathfrak{A}(0) \cdot \mathbf{f}(t) = \mathbf{f}^*(0) \cdot \mathfrak{A}(t) \cdot \mathbf{f}(0) = \mathbf{f}^*(0) \cdot e^{-(i/\hbar)\hat{Q}t} \mathfrak{A}(0) e^{-(i/\hbar)\hat{Q}t} \cdot \mathbf{f}(0)$$

не зависела от t . Следовательно, равенство

$$\mathfrak{A}(t) = e^{(i/\hbar)\hat{Q}t} \mathfrak{A}(0) e^{-(i/\hbar)\hat{Q}t} \quad (2.6.34)$$

и дает зависимость $\mathfrak{A}(t)$ от t , если мы должны рассматривать этот оператор как зависящий от времени.

Предположив, что t становится бесконечно малым dt , мы получим уравнение, связывающее скорость изменения оператора $\mathfrak{A}(t)$ с течением времени с неизвестным пока оператором \hat{Q}

$$\mathfrak{A}(dt) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \hat{Q} dt \right] \mathfrak{A}(0) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \hat{Q} dt \right]$$

или

$$\mathfrak{H} \cdot \mathfrak{A} - \mathfrak{A} \cdot \mathfrak{H} = [\mathfrak{H}, \mathfrak{A}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\mathfrak{A}(dt) - \mathfrak{A}(0)}{dt} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \mathfrak{A}. \quad (2.6.35)$$

Из того, как получено это уравнение, видно, что выражение $d\mathfrak{A}/dt$ можно рассматривать как скорость изменения с течением времени оператора \mathfrak{A} , если мы оставляем векторы состояния постоянными и считаем оператор \mathfrak{A} переменным во времени; это выражение можно также рассматривать как оператор, соответствующий классической скорости изменения динамической переменной A , если оставить операторы постоянными, а векторы состояния изменять.

Например, оператор, соответствующий скорости изменения

q_m координаты q_m , может быть найден из (2.6.35):

$$\dot{q}_m = \frac{i}{\hbar} [\mathfrak{H}, q_m] = \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial p_m}; \quad (2.6.36)$$

здесь для получения последнего выражения мы воспользовались уравнением (2.6.8). Но это последнее выражение является как раз тем, которое нужно для определения природы оператора \mathfrak{H} . В пределе, при больших энергиях и импульсах, это операторное уравнение сводится к классическим уравнениям в обычных переменных. Это может быть верно, если оператор \mathfrak{H} получается из функции Гамильтона для системы заменой входящих в нее переменных p и q соответствующими операторами. Другими словами, если \mathfrak{H} является оператором Гамильтона уравнения (2.6.27), то уравнение (2.6.36) соответствует классическому уравнению (2.6.25).

Этот результат можно перепроверить, так как если в уравнении (2.6.35) положить $\mathfrak{A} = p_m$ и воспользоваться равенством (2.6.8), то мы опять получим

$$\dot{p}_m = \frac{i}{\hbar} [\mathfrak{H}, p_m] = - \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial q_m}, \quad (2.6.37)$$

что соответствует классическому уравнению (2.6.26).

Таким образом, можно сделать вывод, что операторные уравнения движения в квантовой механике имеют в точности ту же самую форму, что и их классические аналоги, но с заменой классических переменных p и q соответствующими операторами p и q . Например, уравнение движения Ньютона принимает вид $m(d^2q/dt^2) = -(\partial \mathfrak{H}/\partial q)$. Взяв средние значения для любого из этих уравнений, убеждаемся непосредственно, что классическая ньютонова орбита является в точности *средней* для всех возможных орбит квантовой механики¹⁾. Другими словами, влияние соотношения неопределенности состоит во введении флуктуаций от классической орбиты. При осреднении они устраняются. Конечно, среднее значение квадратов отклонений не равно нулю и потому может быть наблюдаемо, но в пределе при больших энергиях неопределенность становится ничтожной и квантовая механика незаметно переходит в классическую механику. Это утверждение известно как *принцип соответствия*. Двойственным ему для уравнений является утверждение, что в пределе коммутатор $(i/\hbar)[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}]$ переходит в классическую скобку Пуассона (A, B) . Из соответствия между коммутатором и скобкой Пуассона следует, что *каждая классическая постоянная движения является также квантовомеханической постоянной движения*.

¹⁾ Это утверждение не совсем точное. При усреднении правой части уравнения получим $-\partial \mathfrak{H}/\partial q$, что, вообще говоря, не совпадает с $-\partial \partial(q)/\partial q$. — Прим. ред.

Мы, конечно, можем пожелать иметь дело с функциями преобразования вместо собственных векторов. Эти функции также изменяются с течением времени; в соответствии с уравнением (2.6.33) мы имеем зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\mathcal{H} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi(t, q) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, q), \quad (2.6.38)$$

где $H(p, q)$ — классическая функция Гамильтона, и вектор состояния, зависящий от времени, выражается интегралом

$$e(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t, q) e(q) dq.$$

Для стационарных состояний имеем, очевидно,

$$\mathcal{H} \cdot e(E) = i\hbar \frac{\partial e}{\partial t} = E e(E),$$

так что

$$e(E, t) = e(E, 0) e^{-i(E/\hbar)t}, \quad (2.6.39)$$

где E — собственное значение энергии. Таким образом, зависимость от времени для стационарного состояния является простой гармонической зависимостью с частотой, равной значению энергии, деленному на \hbar , так что соотношение Планка $E = \hbar\nu$, данное в (2.6.1), удовлетворяется.

Таким образом, мы показали, что функция преобразования $\psi(E, q)$ является «волновой функцией», о которой мы говорили в начале этого параграфа. Квадрат величины ее дает плотность вероятности различных конфигураций системы, а интегралы вида $\int \bar{\psi} \mathcal{B} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi dq$ дают средние значения последовательности измерений динамической переменной $B(p, q)$, когда система находится в состоянии, соответствующем ψ . Эта плотность вероятности и эти средние значения исчерпывают все, что может быть получено экспериментально для системы. Для больших систем, имеющих значительную энергию, результаты будут очень мало отличаться от точных предсказаний классической динамики, но для атомных систем неопределенности пропорционально велики и результаты могут существенно отличаться от классических.

Мы показали также, что эти функции преобразования имеют волновые свойства и им сопутствуют интерференционные эффекты, которые влияют на плотность вероятности. Волновое число для волны в данном направлении равно произведению $1/h$ на компоненту импульса в этом направлении, а частота волны равна произведению $1/h$ на энергию системы, как указано в соотношении (2.6.1). Только применяя аппарат теории абстрактных векторов и операторов, а также пользуясь функциями преобразования, возможно построить теорию атомной динамики, которая соответствовала бы экспериментально установленным фактам, например таким, как необходимые неопределенности, возникающие при наблюдении атомных систем.

Функция Гамильтона, зависящая от времени. Обсудив случай, когда время не входит явно в выражение энергии H , причем тогда время играет скорее роль параметра, чем оператора, рассмотрим теперь случай, когда H зависит явно от времени t . В этом случае время, применяемое при описании изменения энергии, должно рассматриваться скорее как оператор (так же, как и координаты), чем как параметр, удобный для того, чтобы следить за развитием движения системы.

Различие становится яснее с точки зрения квантовой механики, чем с классической точки зрения, так как в квантовой механике мы можем отличать оператор, соответствующий времени, от непрерывного распределения его собственных значений. В классической механике мы проводим различие, обозначая явно входящее время через q_t , так что полная энергия является функцией от $q_t, q_1, q_2 \dots q_n$ и импульсов $p_1, p_2 \dots p_n$, которую мы формально обозначаем через $H(q_t, p, q)$.

Эта функция дает надлежащие классические уравнения движения (2.6.25) и (2.6.26) для $\dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots \dot{q}_n$ и $\dot{p}_1, \dot{p}_2 \dots \dot{p}_n$, но не дает соответствующей совокупности уравнений для q_t . На самом деле мы еще не рассматривали сопряженного импульса p_t . Таким образом в случаях когда H явно зависит от времени, мы должны изменить функцию Гамильтона так, чтобы новая функция Гамильтона $H(p_t, q_t; p, q)$ удовлетворяла уравнению

$$\dot{q}_t = \frac{dq_t}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_t}.$$

Но прежде чем решать вопрос о форме H , мы должны выяснить, какой смысл имеет \dot{q}_t . Так как q_t является явным временем, то надо ожидать, что в классической динамике оно будет пропорционально временному параметру t и что в действительности $dq_t/dt = 1$. Следовательно, новая функция Гамильтона Θ должна быть связана с полной энергией $H(q_t; p, q)$ и с новым импульсом p_t уравнением

$$\Theta(p_t, q_t; p, q) = H(q_t; p, q) + p_t. \quad (2.6.40)$$

Тогда уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial \Theta}{\partial p_m} = \dot{q}_m, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial q_m} = -\dot{p}_m, \quad m = t, 1, 2, \dots, n. \quad (2.6.41)$$

Можно показать, что полная скорость изменения Θ с течением времени (обусловленная изменением всех p и всех q с течением времени) равна нулю, так как, пользуясь уравнениями (2.6.41), (2.6.25) и (2.6.26), имеем:

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{\partial \Theta}{\partial q_t} \dot{q}_t + \frac{\partial \Theta}{\partial p_t} \dot{p}_t + \sum_m \left[\frac{\partial \Theta}{\partial q_m} \dot{q}_m + \frac{\partial \Theta}{\partial p_m} \dot{p}_m \right] = 0.$$

Таким образом, новая функция Гамильтона остается постоянной, хотя полная энергия H явно изменяется с течением времени. Кроме того, можно добавить подходящее слагаемое так, чтобы сделать эту постоянную равной нулю: $\Theta = H + p_t = 0$. Это значит, что величина p_t , сопряженная к явному времени q_t , в точности равна значению полной энергии, взятому со знаком минус, $p_t = -E$ (мы пишем E , так как H должно быть выписано как явная функция от q_t и от других p и q , в то время как E является численным значением, изменяющимся с течением времени). Таким образом, явное время является сопряженным к значению энергии, взятому со знаком минус.

Выражения классических скобок Пуассона можно также обобщить, включив в них новую пару переменных

$$(u, v) = \sum_m \left[\frac{\partial u}{\partial p_m} \frac{\partial v}{\partial q_m} - \frac{\partial u}{\partial q_m} \frac{\partial v}{\partial p_m} \right], \quad m = t, 1, \dots, n.$$

Скобка Пуассона, содержащая функцию Гамильтона, может быть вычислена с помощью уравнений (2.6.41)

$$\begin{aligned} (\Theta, v) &= \sum_m \left[\frac{\partial \Theta}{\partial p_m} \frac{\partial v}{\partial q_m} - \frac{\partial \Theta}{\partial q_m} \frac{\partial v}{\partial p_m} \right] = \\ &= \sum_{m=1}^n \left[\frac{\partial v}{\partial q_m} \frac{dq_m}{dt} + \frac{\partial v}{\partial p_m} \frac{dp_m}{dt} \right] + \left[\frac{\partial v}{\partial q_t} + \frac{\partial \Theta}{\partial q_t} \frac{\partial v}{\partial p_t} \right] = \frac{dv}{dt}, \quad (2.6.42) \end{aligned}$$

так как $\partial v / \partial q_t = \partial v / \partial t$ и $\partial \Theta / \partial q_t = 0$.

Введение явного времени и его сопряженного импульса в квантовую механику теперь осуществляется непосредственно. Мы вводим оператор q_t , имеющий несчетную, непрерывную последовательность собственных значений t , которые могут быть использованы для задания частных состояний, представляющих интерес. Сопряженный оператор p_t имеет собственные значения, равные допускаемым значениям энергии, взятым со знаком минус. Эти операторы входят наравне с операторами для различных координат и импульсов конфигураций. Коммутатор равен

$$[p_t, q_t] = \frac{\hbar}{i},$$

так что соответствующее соотношение неопределенности имеет вид $\Delta E \Delta t \simeq \hbar$. Операторы p_t и q_t перестановочны со всеми другими p и q . Уравнения (2.6.8) и (2.6.11) также остаются в силе для этой пары.

Оператор Гамильтона \mathfrak{H} получается теперь заменой в функции полной энергии величин p_m и q_m соответствующими им операторами, причем явное время заменяется оператором q_t ; значит,

$$\mathfrak{H} = H(q_t; p, q) + p_t. \quad (2.6.43)$$

Унитарный оператор, преобразующий вектор состояния для момента t в вектор состояния для момента t' , имеет форму $\exp[(i/\hbar)\mathfrak{H}(t' - t)]$ [см. уравнение (2.6.11)]. Уравнение движения вектора состояния e принимает вид

$$\mathfrak{H} \cdot e(t) = i\hbar \lim \left[\frac{e(t+dt) - e(t)}{dt} \right], \quad (2.6.44)$$

аналогичный уравнению (2.6.12), а уравнение движения для оператора \mathfrak{A} таково:

$$[\mathfrak{H}, \mathfrak{A}] = \frac{\hbar}{i} \frac{d\mathfrak{A}}{dt}.$$

В частности,

$$q_t = \frac{i}{\hbar} [\mathfrak{H}, q_t] = \frac{i}{\hbar} [p_t, q_t] = \mathfrak{J},$$

где \mathfrak{J} — постоянный оператор, преобразующий каждый вектор в самого себя (в гл. 1 мы называли его идемфактором).

Мы теперь можем перейти к свойствам функций преобразования для систем в случае, когда функция Гамильтона явно зависит от времени. Функцию преобразования от q к E (часто называемую волновой функцией Шредингера) мы по-прежнему определяем равенством

$$e(0) = \int \dots \int \psi(0 | q, t) dt dq_1 \dots dq_n e(q, t),$$

где t — собственное значение оператора q_t , q_m — собственное значение оператора q_n и 0 — собственное значение для оператора \mathfrak{H} , данного в уравнении (2.6.43).

Раньше было показано, что оператор \mathfrak{p}_m , действующий на вектор \mathbf{e} , соответствует дифференциальному оператору $(\hbar/i)(\partial/\partial q_m)$, действующему на функцию преобразования; точно так же здесь оператор \mathfrak{p}_t соответствует дифференциальному оператору $(\hbar/i)(\partial/\partial t)$, действующему на ψ . Дифференциальное уравнение для ψ , соответствующее векторному уравнению $\mathfrak{H} \cdot \mathbf{e} = 0$, имеет вид

$$\mathcal{H}\left(t; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \psi(-|q, t) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(-|q, t) = 0. \quad (2.6.45)$$

Это уравнение называется зависящим от времени уравнением Шредингера; его следует сравнить с (2.6.38), где время рассматривалось просто как параметр. Как мы видим, оно получается в результате закономерного расширения описанного ранее метода замены классического уравнения для зависящей от времени функции Гамильтона уравнением квантовой механики для волновой функции ψ . Величина $|\psi|^2$ есть плотность вероятности данной конфигурации в данный момент времени. Среднее значение плотности тока частицы в любой точке, как можно видеть, пропорционально величине

$$\mathbf{e}^* \cdot \mathfrak{p} \cdot \mathbf{e} = \int \dots \int \bar{\psi} \frac{\hbar}{i} \operatorname{grad} \psi dq_1 \dots dq_n,$$

за исключением того, что эта величина не будет обязательно действительной. Тем не менее мы можем теперь подсчитать, каков ток.

Частица в электромагнитном поле. Например, для частицы с зарядом e (заряд электрона равен $-e$) и массой m , движущейся в электромагнитном поле с потенциалами \mathbf{A} и φ , сила, действующая на частицу [на основании уравнения (2.5.12)], равна $e[\mathbf{E} + (1/cm)\mathbf{p} \times \mathbf{H}]$, и полная энергия (нерелятивистская) частицы равна

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

как будет показано в ближайшей главе (стр. 283). Чтобы получить дифференциальное уравнение для ψ , подставим $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ вместо каждого p в выражении H . Здесь нет неясности в порядке множителей в члене $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$; если $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, тогда правильный порядок есть $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$. Уравнение, полученное для ψ , имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e\hbar}{imc} \mathbf{A} \cdot \operatorname{grad} \psi + \left[\frac{e^2 A^2}{2mc^2} + e\varphi \right] \psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0. \quad (2.6.46)$$

Как и в уравнении (2.6.45), в этом уравнении явно содержится мнимая величина i . Это означает, что уравнение для комплексной сопряженной функции $\bar{\psi}$ имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \bar{\psi} + \frac{e\hbar}{imc} \mathbf{A} \cdot \operatorname{grad} \bar{\psi} + \left(\frac{e^2 A^2}{2mc^2} + e\varphi \right) \bar{\psi} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = 0.$$

Если $e\bar{\psi}\bar{\psi}$ является для электромагнитных уравнений плотностью заряда ρ , то плотность тока \mathbf{J} должна быть такой, чтобы удовлетворялось уравнение неразрывности $(\partial\rho/\partial t) + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0$. Применим уравнения для ψ и $\bar{\psi}$, чтобы определить \mathbf{J} . Умножив уравнение для ψ на $\bar{\psi}$, а уравнение для $\bar{\psi}$ — на ψ и вычтя результаты, получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\bar{\psi} \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \bar{\psi}) - \frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \operatorname{grad} (\bar{\psi} \psi) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\psi} \psi) = 0.$$

Но на основе правил векторных операций мы можем показать, что

$$\bar{\psi} \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \bar{\psi} = \operatorname{div} (\bar{\psi} \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \bar{\psi})$$

и если $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, то $\mathbf{A} \cdot \operatorname{grad} (\bar{\psi} \psi) = \operatorname{div} (\mathbf{A} \bar{\psi} \psi)$. Поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t} (e \bar{\psi} \psi) + \operatorname{div} \left[\frac{e \hbar}{2im} (\bar{\psi} \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \bar{\psi}) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \bar{\psi} \psi \right] = 0$$

и если $\rho = e \bar{\psi} \psi$, то плотность тока оказывается равной

$$\mathbf{J} = \frac{e \hbar}{2im} (\bar{\psi} \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \bar{\psi}) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \bar{\psi} \psi. \quad (2.6.47)$$

Это выражение вещественно и, так как ρ и \mathbf{J} удовлетворяют уравнению неразрывности, можно предполагать, что они являются выражениями, которые можно подставить в уравнения Максвелла вместо зарядов и тока. Отметим, что эти выражения являются лишь вероятностными плотностями, а не «истинными плотностями» в классическом смысле. Тем не менее этот вывод находится в согласии с нашим новым пониманием того, что является наблюдаемым; так как «истинные» положения и импульсы отдельных электронов мы не можем знать точно, то из волновой функции должны вытекать пригодные выражения только для плотностей. Как сказано в начале этого параграфа, они содержат квадраты модуля величины ψ , характеризующие квантовые плотности и вероятности.

Относительность и спин. Соотношение между четырьмя импульсными операторами для отдельной частицы и соответствующими дифференциальными операторами, действующими на функцию преобразования $\psi(|q, t)$ (пустое место перед вертикальной чертой обозначает, что ψ можно взять для любого собственного вектора и собственного значения)

$$p_m \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_m}, \quad q_m = x, y, z, t, \quad (2.6.48)$$

является соотношением между четырехмерными векторами, которое может удовлетворять требованиям специальной теории относительности. Тем не менее зависящее от времени уравнение Шредингера (2.6.46) не является инвариантом преобразования Лоренца, даже в случае свободного движения, когда \mathbf{A} и φ равны нулю. Пространственные операторы содержатся в выражениях вторых производных, а оператор времени — в выражении первой производной, и никакая комбинация p_x^2, p_y^2, p_z^2 и $p_t = -E$ не может быть инвариантом преобразования Лоренца.

Трудность лежит, конечно, в том, что выражение, которое мы применяли для $H(p, q)$ в случае частицы, находящейся в электромагнитном поле, не было релятивистским инвариантным, но являлось просто первым приближением к правильной релятивистской функции Гамильтона. Эта величина может быть получена, если, комбинируя четырехмерный вектор $p_x, p_y, p_z, -(i/c)H$ (см. стр. 99) с четырехмерным вектором $A_x, A_y, A_z, i\varphi$ (см. стр. 203), составить инвариантное относительно преобразования Лоренца уравнение

$$-\left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 - \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 - \left(p_z - \frac{e}{c} A_z \right)^2 + \left(\frac{1}{c} H - \frac{e}{c} \varphi \right)^2 = m^2 c^2. \quad (2.6.49)$$

Отсюда можно получить релятивистское выражение для функции Гамильтона

$$H(p, q) = e\varphi + c \sqrt{m^2 c^2 + p^2 - (2e/c) \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + (e/c)^2 A^2}. \quad (2.6.50)$$

Это и есть та функция, которая должна быть превращена в дифференциальный оператор, чтобы получить правильное зависящее от времени уравнение Шредингера.

Однако этот результат ставит только более трудную задачу: как интерпретировать оператор, содержащий квадратный корень из второй производной? Понятно, мы могли бы разложить радикал в ряд по возрастающим степеням $1/m^2c^2$ (функция Гамильтона на стр. 245 представляет собой два первых члена такого ряда с отброшенным постоянным слагаемым mc^2), но такой ряд содержал бы все производные высших порядков функции ψ и дал бы чрезвычайно «неаккуратное» уравнение, если даже можно было бы надеяться на его сходимость. Возможное решение заключается в том, чтобы воспользоваться уравнением (2.6.49) в том виде, как оно написано, помня, что величина $-(1/c)H$ является четвертой компонентой вектора импульса и должна быть заменена через $(\hbar/c)(\partial/\partial t)$. Если поля равны нулю, это приводит к уравнению

$$\nabla^2\psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi = 0, \quad (2.6.51)$$

которое является *уравнением Клейна — Гордона* [см. (2.1.27)].

Это уравнение для функции преобразования является релятивистски инвариантным, но имеет тот недостаток, что если $e|\psi|^2$ есть плотность заряда, то величина, данная в (2.6.47), не является плотностью тока. В самом деле, интеграл от $|\psi|^2$, распространенный на все пространство, не будет больше всегда постоянным, как это имеет место для решения уравнения (2.6.46), так что не ясно, будет ли $e|\psi|^2$ плотностью заряда. Мы отложим до следующей главы разыскание точных выражений для φ и для J ; необходимо только установить здесь, что уравнение Клейна — Гордона не является точным уравнением для электронов или для любой частицы со спином.

Зависящее от времени уравнение Шредингера (2.6.46) является вполне удовлетворительным для частиц, движущихся медленно по сравнению со скоростью света, но оно не учитывает двух обстоятельств: относительности и спина. Мы знаем, что электрон имеет спин, и рассмотрели в § 1.6 и 1.7 свойства спиновых операторов. Эти спиновые операторы соответствуют дополнительной степени свободы электрона, которой, по-видимому, отвечают новые координата и импульс. Следовательно, если бы мы пожелали, мы могли подсчитать функцию преобразования, содержащую эту новую координату, и получить выражение для оператора спина посредством дифференцирования по этой координате. Так как правила действий со спиновым оператором очень просты, обычно легче иметь дело с вектором состояния.

Поэтому функции, употребляемые здесь, являются смешанными, состоящими из функций преобразования для пространственных компонент и компоненты времени, а также вектора состояния a для части, соответствующей спину. Полный вектор состояния может быть, таким образом, представлен следующим равенством:

$$e(E, s) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \psi(E | q_1, q_2, \dots, q_n) e(q_1, \dots, q_n) a(s) dq_1 \dots dq_n,$$

где s — то или другое из двух собственных значений $\pm \hbar/2$ спинового оператора S и a — один из спиновых векторов, определенных в уравнениях (1.6.44). Поэтому если мы имеем функцию Гамильтона (нерелятивистскую), которая содержит оператор спина S , так же как и p и q , а также и время, то гибридный вектор волновой функции и спина имеет

вид $\Psi = \psi_+(\mid q, t) \mathbf{a}(\hbar/2) + \psi_-(\mid q, t) \mathbf{a}(-\hbar/2)$ и уравнение принимает вид

$$\mathcal{H}\left(t, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q; \mathfrak{S}\right) \Psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = 0,$$

что соответствует уравнению (2.6.45). Среднее значение величины $B(p, q; \mathfrak{S})$ для состояния, обозначенного через Ψ , равно тогда

$$\int \dots \int \overline{\Psi} \mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q; \mathfrak{S}\right) \Psi dq_1 \dots dq_n,$$

где часть оператора, связанная с \mathfrak{S} , действует на спиновые векторы \mathbf{a} , а дифференциальные операторы действуют на волновую функцию Ψ .

Но это решение все еще не дает нам волновой функции (для частицы), которая содержала бы спин и была бы релятивистской. Чтобы достигнуть этого, мы обратимся к спинорным операторам, рассмотренным в § 1.7. Единичные векторы $\sigma_1, \dots, \sigma_4$, определенные в уравнении (1.7.17), дают операторы, которые ведут себя подобно компонентам четырехмерного вектора. Они действуют на векторы состояния \mathbf{e} , которые имеют только два различных направления: одно соответствует z -компоненте спина, равной $\hbar/2$, другое — компоненте, равной $-(\hbar/2)$ (направление оси z произвольно). Возникает мысль, что для получения волнового уравнения, инвариантного относительно преобразования Лоренца и содержащего спин, необходимо составить скалярное произведение четырехмерного вектора $p_x, p_y, p_z, p_t/c = -E/c$ на четырехмерный векторный спиновый оператор. Так как скалярное произведение двух четырехмерных векторов является инвариантом преобразования Лоренца, мы получим таким образом волновое уравнение, которое содержит первую производную по времени [как в уравнении (2.6.45), но не в (2.6.51)] и которое является также релятивистским [как уравнение (2.6.51), но не (2.6.45)]. Мы можем надеяться с помощью такого уравнения составить уравнение неразрывности так, чтобы можно было определить плотность заряда и тока [как мы это сделали в формуле (2.6.47) для решений уравнений (2.6.45)].

Простейшей формой такого уравнения является та, в которой результат действия скалярного произведения четырехмерных векторов σ и p на спинор \mathbf{e} приравнен произведению постоянной на \mathbf{e} ; для волновой функции Ψ , равной, как и раньше, сумме двух функций положения, умноженных на два спиновых вектора, мы должны иметь

$$\frac{\hbar}{i} \left[\sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_2 \frac{\partial}{\partial y} + \sigma_3 \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi = \left[\text{const} - \frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi,$$

так как $\sigma_4 = \mathfrak{J}$ и E для волновой функции заменяется через $-(\hbar/i)(\partial/\partial t)$. Трудность заключается только в том, что вектор $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ является аксиальным вектором (см. стр. 106), в то время как градиент есть истинный вектор, так что величина, стоящая в скобках в правой части уравнения, будет псевдоскаляром (см. стр. 22), меняющим знак при перемене ориентации координат. Чрезвычайно трудно видеть, какую основную постоянную мы могли бы найти так, чтобы она была псевдоскаляром; в самом деле, это настолько трудно, что мы вынуждены искать менее простую форму, которая позволила бы обойтись без псевдоскаляра.

Такая менее простая форма состоит из пары уравнений

$$(\sigma \cdot p) \mathbf{e} = \left[a + \frac{E}{c} \right] \mathbf{f}; \quad (\sigma \cdot p) \mathbf{f} = \left[b + \frac{E}{c} \right] \mathbf{e},$$

где \mathbf{e} и \mathbf{f} — различные векторы состояния. Исключая \mathbf{f} и пользуясь задачей 1.33, мы обнаруживаем, что $b = -a$; a тогда может быть настоящим скаляром, а не псевдоскаляром, и \mathbf{e} отлично от \mathbf{f} . Любопытно

отметить, что эта пара уравнений аналогична уравнениям электромагнитного поля в свободном пространстве

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}; \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t},$$

здесь опять-таки мы не могли бы описать электромагнитное поле с помощью только одного вектора (скажем \mathbf{E}), пользуясь вихревым оператором в одной части равенства и производной по времени — в другой. Действительно, если попробовать рассмотреть уравнение

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = a \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t},$$

то вихревой оператор меняет знак при переходе от правой к левой системе координат, в то время как $\partial/\partial t$ знака не меняет. Поэтому a должно было бы быть псевдоскаляром, что было бы истинным бедствием для электромагнетизма, как и в случае волнового уравнения для e .

Величины e и f можно считать векторами одного и того же спинового пространства, связанного с приведенными выше уравнениями так же, как мы считаем E и H векторами одного и того же трехмерного пространства. Но так как e и f — независимые векторы (в том же смысле, что и E и H) и так как спиновое пространство не является настолько «физическими», как трехмерное пространство, то обычно рассматривают f как вектор *другого спинового пространства*, перпендикулярного к пространству, в котором находится e . Другими словами, мы составляем *четырехмерное* спиновое пространство со взаимно-перпендикулярными единичными векторами e_1, e_2, e_3, e_4 и обеспечиваем независимость векторов e и f друг от друга тем, что вектор e считаем комбинацией e_1 и e_2 , а вектор f — комбинацией e_3 и e_4 .

При такой интерпретации переход от e к f является вращением из одного подпространства в другое; это вращение может быть представлено оператором ρ таким, что $\rho \cdot e = f$ и $\rho \cdot f = e$. Аналогичным образом замена a на $(-a)$ в приведенной выше паре уравнений может быть выражена в операторной форме с помощью оператора ρ_0 такого, что $\rho_0 e = e$ и $\rho_0 f = -f$. С помощью этих представлений два уравнения, написанные выше, могут быть объединены теперь в одно уравнение

$$\rho \cdot (\sigma \cdot \rho) e = [-\rho_0 a + (E/c)] e, \quad (2.6.52)$$

где e стоит вместо e или f .

Мы теперь должны распространить наши операторные определения спинового оператора σ на четырехмерное пространство; эти определения вместе с детализированными определениями ρ , ρ_0 и $\alpha = \rho \cdot \sigma$ имеют вид

$$\begin{array}{llll} \sigma_x e_1 = e_2, & \sigma_x e_2 = e_1, & \sigma_x e_3 = e_4, & \sigma_x e_4 = e_3, \\ \sigma_y e_1 = i e_2, & \sigma_y e_2 = -i e_1, & \sigma_y e_3 = i e_4, & \sigma_y e_4 = -i e_3, \\ \sigma_z e_1 = e_1, & \sigma_z e_2 = -e_2, & \sigma_z e_3 = e_3, & \sigma_z e_4 = -e_4, \\ \rho e_1 = e_3, & \rho e_2 = e_4, & \rho e_3 = e_1, & \rho e_4 = e_2, \\ \rho_0 e_1 = e_1, & \rho_0 e_2 = e_2, & \rho_0 e_3 = -e_3, & \rho_0 e_4 = -e_4, \\ \alpha_x e_1 = e_4, & \alpha_x e_2 = e_3, & \alpha_x e_3 = e_2, & \alpha_x e_4 = e_1, \\ \alpha_y e_1 = i e_4, & \alpha_y e_2 = -i e_3, & \alpha_y e_3 = i e_2, & \alpha_y e_4 = -i e_1, \\ \alpha_z e_1 = e_3, & \alpha_z e_2 = -e_4, & \alpha_z e_3 = e_1, & \alpha_z e_4 = -e_2. \end{array} \quad (2.6.53)$$

Заметим, что оператор ρ перестановчен с операторами $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$, но что $\rho \rho_0 + \rho_0 \rho = 0$. Оператор ρ_0 поэтому перестановчен с оператор-

рами σ , но не перестановочен с α . В матричной форме эти операторы имеют вид

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & p &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ p_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \alpha_0, & \alpha_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \alpha_y &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \alpha_z &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix};\end{aligned}$$

при этом, начиная отсюда, символы α_0 и p_0 мы будем считать взаимозаменяемыми.

Операторное уравнение (2.6.52), действующее на некоторый вектор e , являющийся комбинацией единичных четырехмерных векторов e_1, e_2, e_3, e_4 , мы можем составить с помощью этих операторов следующим образом:

$$[p(\sigma \cdot p) + p_0 a] \cdot e = (E/c) e$$

или

$$[\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + p_0 a] \cdot e = (E/c) e. \quad (2.6.54)$$

Мы должны теперь «возвести в квадрат» это уравнение, чтобы получить форму его, аналогичную форме (2.6.49).

Уравнение Дирака. Если электромагнитное поле равно нулю, уравнение (2.6.49) принимает вид

$$[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2] = (p_t/c)^2.$$

Взяв уравнение (2.6.54) и возведя в квадрат операторы в обеих частях (и помня о том, что $\alpha_x \alpha_y$ не равно $\alpha_y \alpha_x$ и т. д.), получаем

$$\{[\alpha_x^2 p_x^2 + \alpha_y^2 p_y^2 + \alpha_z^2 p_z^2 + p_0^2 a^2] + [\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x] p_x p_y + [\alpha_z \rho_0 + \rho_0 \alpha_z] \alpha_z p_z\} \cdot e = (p_t/c)^2 e.$$

Чтобы это уравнение соответствовало уравнению (2.6.49) в написанной выше формуле, должно быть

$$\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \rho_0^2 = 1; \quad \alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x = \dots = \alpha_z \rho_0 + \rho_0 \alpha_z = 0 \quad (2.6.55)$$

и

$$a = mc.$$

Изучение уравнений (2.6.53) показывает, что операторы, определенные там, удовлетворяют требованиям (2.6.55), так что мы, наконец, получили релятивистское уравнение для отдельной частицы массы m , которое содержит член с первой степенью оператора, соответствующего E (или

оператора \hat{p}_i). Для получения этого уравнения мы были вынуждены расширить наше «спиновое пространство» от двух до четырех измерений. Два из этих состояний спина (e_1, e_2) соответствуют члену $+mc^2$ в выражении полной энергии, а другие два соответствуют члену $(-mc^2)$, отрицательной энергии. Мы знаем теперь, что состояние с отрицательной энергией связано с позитроном—частицей, имеющей заряд, противоположный заряду электрона, но одинаковую с ним массу.

Волновое уравнение для отдельной частицы, имеющей заряд e и массу m , в электромагнитном поле является уравнением для комбинации волновой функции и спинового вектора

$$\begin{aligned}\Psi &= \psi_1 e_1 + \psi_2 e_2 + \psi_3 e_3 + \psi_4 e_4, \\ \bar{\Psi} &= \bar{\psi}_1 e_1^* + \bar{\psi}_2 e_2^* + \bar{\psi}_3 e_3^* + \bar{\psi}_4 e_4^*,\end{aligned}\quad (2.6.56)$$

где ψ —функции от x, y, z и t , а e —ортогональные единичные векторы в спиновом пространстве. Уравнение, называемое *уравнением Дирака*, имеет вид

$$\begin{aligned}&\left[\alpha_0 mc + \alpha_x \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_y \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + \right. \\ &\left. + \alpha_z \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) + e\varphi \right] \Psi = \left\{ \alpha_0 mc\Psi + \alpha \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \operatorname{grad} \Psi - \frac{e}{c} \mathbf{A}\Psi \right] + \right. \\ &\left. + e\varphi\Psi \right\} = -\frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t} \Psi,\end{aligned}\quad (2.6.57)$$

где оператор α представляет собой вектор с компонентами $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ и где $\alpha_0 = \rho_0$. Операторы подчиняются правилам, содержащимся в равенствах (2.6.53) и (2.6.55). Уравнение для $\bar{\Psi}$ получается из (2.6.57) при переносе знаков у всех членов, содержащих i .

Мы должны теперь посмотреть, приводят ли все эти изыскания к уравнению, допускающему разумные выражения для плотности заряда и тока. Представляется целесообразным за плотность заряда принять выражение

$$p = e\bar{\Psi}\Psi = e[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2];\quad (2.6.58)$$

рассуждая, как прежде, умножая уравнение для Ψ на $\bar{\Psi}$, а уравнение для $\bar{\Psi}$ —на Ψ и вычитая результаты, мы получаем

$$-(\partial/\partial t)(\bar{\Psi}\Psi) = c[\Psi\alpha \cdot \operatorname{grad} \Psi + \Psi\alpha \cdot \operatorname{grad} \bar{\Psi}] = c \operatorname{div}(\bar{\Psi}\alpha\Psi).$$

Поэтому вектор с компонентами

$$\begin{aligned}ce(\bar{\Psi}\alpha_x\Psi) &= ce[\bar{\psi}_1\psi_4 + \bar{\psi}_2\psi_3 + \bar{\psi}_3\psi_2 + \bar{\psi}_4\psi_1] = J_x, \\ ce(\bar{\Psi}\alpha_y\Psi) &= -ice[\bar{\psi}_1\psi_4 - \bar{\psi}_2\psi_3 + \bar{\psi}_3\psi_2 - \bar{\psi}_4\psi_1] = J_y, \\ ce(\bar{\Psi}\alpha_z\Psi) &= ce[\bar{\psi}_1\psi_3 - \bar{\psi}_2\psi_4 + \bar{\psi}_3\psi_1 - \bar{\psi}_4\psi_2] = J_z\end{aligned}\quad (2.6.59)$$

является вектором плотности тока \mathbf{J} .

Интересно отметить, что, в то время как плотность импульса частицы равна $\bar{\Psi}\rho\Psi = (\hbar/i)\bar{\Psi}\operatorname{grad}\Psi$, плотность скорости оказывается равной $c\bar{\Psi}\alpha\Psi$. Это может быть показано другим способом. Подставим в уравнение Гамильтона $\partial H/\partial p = q = u$ выражение (2.6.50) (для простоты мы не включаем поля и предполагаем, что ось x направлена вдоль \mathbf{u}). Тогда

$$\mathbf{u} = \frac{cp}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}} \text{ или } \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{u}}{\sqrt{1 - (u/c)^2}}$$

[см. уравнение (1.7.5)] и

$$H = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(u/c)^2}} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{p} + mc^2 \sqrt{1 - (u/c)^2}.$$

Сравнивая это классическое выражение полной энергии свободной частицы (релятивистское) с уравнением (2.6.54), мы видим, что при переходе к уравнению Дирака вместо скорости частицы u ставится векторный оператор α , а вместо $\sqrt{1 - (u/c)^2}$ — оператор α_0 .

Преобразования операторов α , спинового вектора e и волновой функции при лоренцовом вращении пространства—времени или при вращении пространства могут быть выполнены на основе изложенного в § 1.7. Например, если преобразование соответствует относительной скорости $u = c \operatorname{th} \theta$ вдоль оси x , величины p и A преобразуются по правилам, справедливым для четырехмерных векторов

$$p_x = p'_x \operatorname{ch} \theta + \frac{1}{c} p'_t \operatorname{sh} \theta; \quad p_y = p'_y; \quad p_z = p'_z; \quad p_t = p'_t \operatorname{ch} \theta + c p'_x \operatorname{sh} \theta.$$

Спиновые векторы e преобразуются согласно формуле $e' = g \cdot e$, где

$$g = e^{i\alpha_x/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\alpha_x}{2} \right)^n = \operatorname{ch} \frac{\theta}{2} + i\alpha_x \operatorname{sh} \frac{\theta}{2},$$

так как $\alpha_x^2 = 1$. Сопряженный оператор g^* , такой, что $e = g^* \cdot e'$, равен в этом случае g . Поэтому новая волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi' = g\Psi &= \operatorname{ch}(\theta/2) [\psi_1 e_1 + \psi_2 e_2 + \psi_3 e_3 + \psi_4 e_4] + \\ &\quad + \operatorname{sh}(\theta/2) [\psi_4 e_1 + \psi_3 e_2 + \psi_2 e_3 + \psi_1 e_4]. \end{aligned} \quad (2.6.60)$$

Операторы α преобразуются по формуле $g^* \cdot \alpha \cdot g = \alpha'$. Для симметрии мы полагаем $\alpha_t = \mathfrak{J}/c$ [см. уравнение (1.7.17)], где \mathfrak{J} — идемфактор. Имеем тогда

$$\begin{aligned} \alpha'_t &= \alpha_t \operatorname{ch} \theta + (1/c) \alpha_x \operatorname{sh} \theta, \\ \alpha'_x &= \alpha_x \operatorname{ch} \theta + c \alpha_t \operatorname{sh} \theta, \\ \alpha'_y &= e^{i\alpha_x/2} \alpha_y e^{-i\alpha_x/2} = e^{i\alpha_x/2} e^{-i\alpha_x/2} \alpha_y = \alpha_y, \\ \alpha'_z &= \alpha_z; \quad \alpha'_0 = \alpha_0, \end{aligned}$$

так что $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ преобразуются подобно четырехмерному вектору. Поэтому скалярное произведение α на четырехмерный вектор импульса является инвариантом преобразования Лоренца, так что

$$\sum_{xyzt} \alpha_x p_x = [\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \alpha_t p_t] = \sum_{xyzt} g^* \alpha_x g p'_x = \sum_{xyzt} \alpha'_x p'_x.$$

Поэтому уравнение в нештрихованных координатах можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\sum_{xyzt} \alpha_x \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_0 mc \right] \Psi = \\ &= \left[\sum_{xyzt} g^* \alpha_x g \left(p'_x - \frac{e}{c} A'_x \right) + g^* \alpha_0 m c g \right] \Psi = \\ &= g^* \left[\sum_{xyzt} \alpha_x \left(p'_x - \frac{e}{c} A'_x \right) + \alpha_0 mc \right] \Psi; \end{aligned}$$

при этом получается уравнение в штрихованных координатах.

Для вращения в пространстве на угол θ около оси x оператор вращения для величин e и α выражается достаточно хорошими равенствами

$$g = e^{-\theta \alpha_y \alpha_z / 2}, \quad g^* = e^{\theta \alpha_y \alpha_z / 2} \quad (2.6.61)$$

и уравнения преобразования имеют вид

$$\begin{aligned} p_t &= p'_t, \quad p_x = p'_x, \quad p_y = p'_y \cos \theta + p'_z \sin \theta, \\ p_z &= -p'_y \sin \theta + p'_z \cos \theta, \quad e' = ge, \quad \alpha' = g^* \alpha g. \end{aligned}$$

Более сложные вращения всегда могут быть разложены на несколько вращений рассмотренных здесь типов; соответствующие операторы вращения g являются произведениями отдельных g для составляющих простых вращений, взятых в надлежащем порядке.

Полный момент количества движения. В качестве упражнения на применение операторов α и σ мы покажем, что в случае отсутствия электромагнитного поля полный момент количества движения частицы не является только механическим моментом M [см. уравнение (1.6.42)], но представляет собой комбинацию момента M и спинового вектора σ . Другими словами, мы должны включить спин частицы для того, чтобы получить постоянную движения, которую мы называем полным моментом количества движения. На основании уравнения (2.6.35) мы видим, что для постоянной движения, изображаемой оператором \mathcal{H} , мы должны иметь

$$\mathcal{H}\mathcal{A} - \mathcal{A}\mathcal{H} = 0,$$

где \mathcal{H} — оператор Гамильтона.

В данном случае, при равенстве нулю потенциалов A и φ , мы имеем для оператора Гамильтона, согласно уравнению (2.6.57),

$$\mathcal{H} = \alpha_0 mc^2 + c(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z).$$

Оператор для компоненты вдоль оси z механического момента количества движения имеет вид $M_z = \xi p_y - \eta p_x$. Составим коммутатор $\mathcal{H}M_z - M_z\mathcal{H}$, чтобы показать, что он не равен нулю. Здесь операторы α перестановочны с операторами p и координатами, операторы p перестановочны друг с другом, так что в \mathcal{H} только член с $\alpha_x p_x$ не перестановочен с первым членом M_z и только член с $\alpha_y p_y$ не перестановочен со вторым членом M_z , так что

$$\mathcal{H}M_z - M_z\mathcal{H} = -c\alpha_y p_x(p_y\eta - \eta p_y) + c\alpha_x p_y(p_x\xi - \xi p_x).$$

Но $p_x\xi - \xi p_x = (\hbar/i)$ и т. д., и наше выражение оказывается равным

$$\mathcal{H}M_z - M_z\mathcal{H} = -(\hbar c/i)(p_x\alpha_y - p_y\alpha_x),$$

что, конечно, не равно нулю, так что M_z не является постоянной движения.

Пользуясь правилами (2.6.53) применения операторов, мы можем показать, что [сравните с уравнениями (1.6.44)]

$$\begin{aligned} (\sigma_x)^2 &= (\sigma_y)^2 = (\sigma_z)^2 = 1, \quad \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, \\ \sigma_x \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_x = -i\sigma_y, \quad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x. \end{aligned} \quad (2.6.62)$$

Кроме того, так как оператор p перестановочен с операторами σ и так как $\alpha = p\sigma$, мы можем получить другие уравнения

$$\sigma_x \alpha_x = \alpha_x \sigma_x = p, \quad \alpha_x \sigma_z = -\sigma_z \alpha_x = i\alpha_y, \quad \alpha_y \sigma_z = -\sigma_z \alpha_y = i\alpha_x \text{ и т. д.}$$

Следовательно, мы можем показать, что

$$\mathcal{H}\sigma_z - \sigma_z\mathcal{H} = (2c/i)(p_x\alpha_y - p_y\alpha_x).$$

Сравнивая между собой коммутаторы для \mathfrak{M}_z и σ_z , мы видим, что комбинация $[\mathfrak{M}_z + (\hbar/2)\sigma_z]$ перестановочна с \mathfrak{H} и, таким образом, является постоянной движения. Это верно также для компонент по осям x и y .

Таким образом, полный момент количества движения, являющийся постоянной движения, равен сумме механического (орбитального) момента \mathfrak{M} и произведения $\hbar/2$ на спиновой вектор σ .

Волновая функция свободного поля. В качестве другого примера мы получим волновую функцию, когда отсутствует внешнее поле. Для случая свободного поля уравнение Дирака (2.6.57) принимает вид

$$\alpha_0 mc \Psi + \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \Psi = -\frac{\hbar}{ic} \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Решением этого уравнения является

$$\Psi = [A_1 \mathbf{e}_1 + A_2 \mathbf{e}_2 + A_3 \mathbf{e}_3 + A_4 \mathbf{e}_4] e^{(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}, \quad (2.6.63)$$

где A — численные коэффициенты, $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ — радиус-вектор, вектор $\mathbf{p} = p_x \mathbf{i} + p_y \mathbf{j} + p_z \mathbf{k}$ — классический вектор импульса с компонентами p_x , p_y , p_z , которые являются постоянными, а не операторами; число E есть величина энергии электрона для состояния, обозначенного через Ψ .

Подставив это в уравнение Дирака, выполнив дифференцирования и спинорные операции в соответствии с равенствами (2.6.53), мы окончательно получим (не уменьшая общности, мы положили $p_z = p$, $p_x = p_y = 0$)

$$[(mc^2 - E) A_1 + cp A_3] \mathbf{e}_1 + [(mc^2 - E) A_2 - cp A_4] \mathbf{e}_2 + \\ + [(-mc^2 - E) A_3 + cp A_1] \mathbf{e}_3 + [(-mc^2 - E) A_4 - cp A_2] \mathbf{e}_4 = 0.$$

Отсюда следует, что четыре коэффициента при векторах равны нулю; это приводит к четырем однородным уравнениям для четырех коэффициентов A : двум, содержащим A_1 и A_3 , и двум, содержащим A_2 и A_4 . Обе пары могут быть решены, если выполняется равенство $E^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2$. Таким образом, имеем четыре решения: два соответствуют значению энергии

$$E = -mc^2 \sqrt{1 + (p/mc)^2} \underset{p \ll mc}{\approx} -\left[mc^2 + \frac{1}{2}(p^2/m) \right]$$

и имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= C [-\beta \mathbf{e}_1 + (1 + \gamma) \mathbf{e}_3] e^{(i/\hbar)(pz + mc^2\gamma t)}, \\ \Psi_2 &= C [\beta \mathbf{e}_2 + (1 + \gamma) \mathbf{e}_4] e^{(i/\hbar)(pz + mc^2\gamma t)}; \end{aligned} \quad (2.6.64)$$

другие два соответствуют значению энергии

$$E = +mc^2 \gamma \underset{\beta \rightarrow 0}{\approx} \left[mc^2 + \frac{1}{2}(p^2/m) \right],$$

имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_3 &= C [(1 + \gamma) \mathbf{e}_1 + \beta \mathbf{e}_3] e^{(i/\hbar)(pz - mc^2\gamma t)}, \\ \Psi_4 &= C [(1 + \gamma) \mathbf{e}_2 - \beta \mathbf{e}_4] e^{(i/\hbar)(pz - mc^2\gamma t)}, \end{aligned}$$

где $\beta = (p/mc)$ и $\gamma = \sqrt{1 + \beta^2}$, а C — нормирующая постоянная. Функции Ψ_1 и Ψ_3 соответствуют спину $\hbar\sigma_z/2$, равному $+\hbar/2$ (так как $\sigma_z \Psi_1 = \Psi_1$ и т. д.), а Ψ_2 и Ψ_4 соответствуют спину $-\hbar/2$.

Резюме. В этой главе мы постарались наметить основные связи между различными явлениями в классической и квантовой физике и различными видами полей, рассмотренными в гл. 1. Эту связь обычно можно представить, с известной степенью приближения, с помощью дифференциальных уравнений, задающих поведение от точки к точке поля, кото-

рое должно описывать частное физическое явление. В классической физике мы обнаружили, что надо было провести осреднение атомистических дискретностей; в квантовой физике мы нашли, что принцип неопределенности мешает нашему «изучению» непрерывной волновой функции, являющейся корнем квадратным из вероятности; оказалось, что разрывные детали траекторий элементарных частиц невозможно измерять и предсказывать. В обоих случаях мы пришли к непрерывному полю — скалярному, векторному или аффинорному, подчиненному дифференциальному уравнению с частными производными и заданному однозначно посредством некоторой совокупности граничных условий (или начальных условий, или тех и других вместе).

Мы видели, что одни и те же поля и одни и те же дифференциальные уравнения оказываются в связи со многими и различными физическими явлениями. Мы нашли, например, что скалярное поле, удовлетворяющее уравнению Лапласа, может представлять или электрическое поле вблизи группы зарядов, или плотность диффундирующей жидкости в стационарных условиях, или потенциал скорости установившегося течения несжимаемой жидкости, или гравитационный потенциал вблизи группы материальных тел и т. д. С точки зрения этой книги этот недостаток математической оригинальности со стороны природы дает большую экономию сил и времени. Занимаясь изучением решений одного уравнения, мы одновременно будем решать несколько дюжин задач из различных областей физики.

Мы не углублялись в подробности относительно физической стороны различных примеров, рассмотренных в этой главе; эта книга в основном занимается решением уравнений, если они уже получены. Например, в области квантовой механики мы преодолели искушение выйти за рамки беглого наброска новой точки зрения в динамике. Изложение достаточно только для того, чтобы позже, при изучении решений уравнений Шредингера и Дирака, можно было понять физический смысл решений. Превышение этого сделало бы данный параграф учебником по квантовой механике, что было бы совершенно излишним.

Для подробного изучения затронутых физических явлений пригодны другие книги, посвященные различным отделам физики.

Нельзя отрицать того, что на рассмотрение уравнений квантовой механики затрачено времени больше, чем на уравнения классических полей. Эти более новые уравнения менее привычны, и, таким образом, они дают возможность показать, какие способы рассуждений должны быть использованы при выводе новых уравнений полей для описания новых явлений. Классические уравнения полей выдержали проверку нескольких поколений ученых, и логическая структура связи с «действительностью» сделалась «второй природой» физиков. В квантовой механике мы еще не закончили полностью процесс рационализации, преобразующий «работающие» непривычные уравнения в логически обоснованную теорию, «очевидную для каждого».

Новое уравнение для описания нового явления редко выводится впервые с помощью строгих логических рассуждений из хорошо известных физических фактов; достаточно строгий вывод уравнения удается обычно получить только тогда, когда теория становится «очевидной». Первое получение уравнения обычно приходит менее дедуктивным путем, с помощью аналогий, «работы назад», а также постоянного применения современного аналога бритвы Оккама¹⁾). В уравнении Дирака, например,

¹⁾ «Бритвой Оккама» называют изречение этого философа: «Essentia non sunt multiplicanda praeter necessitatem» («Сущности не должны быть увеличиваемы в числе без необходимости»). — Прим. ред.

мы придерживались определенной общей формы уравнения, так как было вероятно, что уравнение должно быть релятивистски инвариантным и мы искали *простейшее* уравнение, которое привело бы нас к «разумным» (т. е. не чрезмерно сложным) выражениям для заряда, тока и других измеримых количеств. Результат мог показаться на первый взгляд не очень простым, но читателю достаточно немного дней исследования (или чтения старых номеров журналов, выпущенных в тот период когда выводилось уравнение Дирака), чтобы убедиться в том, что много легче составить более сложные уравнения, чем найти уравнение более простое.

Среди общих принципов, которые можно использовать для того, чтобы наметить направление поисков новых уравнений, одним из наиболее важных является требование инвариантности, в частности инвариантности относительно преобразования Лоренца. Но существуют и другие пути. Например, обычно сначала ищут линейные уравнения; часто применяют оператор Лапласа.

Когда уравнение составлено, необходимо исследовать все входящие в него величины, чтобы убедиться в том, достаточно ли они «соответствуют» различным физическим величинам. Обычно здесь встречается, например, плотность энергии; тогда соответствующая выбранная величина не должна обладать неприятным свойством становиться где-либо и когда-либо отрицательной. В качестве путеводной нити при получении уравнения Дирака мы выбрали выражения для плотности тока и плотности заряда, а также требование, чтобы эти выражения удовлетворяли уравнению неразрывности. Формальным аппаратом для получения этих вспомогательных величин является вариационный метод, который мы рассмотрим в ближайшей главе. Когда эти величины обоснованы, можно решить, являются ли они слишком сложными или нет.

Другой полезный способ испытать уже составленное уравнение состоит в том, чтобы найти другое физическое явление, к которому можно было бы применить то же самое уравнение. Свойство решений уравнения Клейна — Гордона могут быть изучены с помощью струны в резиновой оболочке (см. стр. 139), которая удовлетворяет тому же самому уравнению и которую легче представить себе, чем волновую функцию, так как движения струны достаточно хорошо известны. Аналогии этого вида встречаются в теоретической физике повсюду и приводят к своего рода перекрестному опылению, чрезвычайно полезному. Раннее изучение переменного электрического тока было значительно облегчено благодаря аналогии с более знакомым механическим осциллятором. Теперь, когда «каждый слыхал» про переменные токи, мы склонны и при изучении других видов колебательных и волновых движений (даже механического осциллятора) говорить об импедансах, емкостях и т. д.

В ближайшей главе мы подробно рассмотрим аналогию между поведением поля и вариационными принципами классической динамики, развитыми Гамильтоном. Мы найдем, что эта аналогия является полезным унифицирующим фактором при изучении всех уравнений, рассмотренных в этой главе (а также и других).

Задачи к главе 2

2.1. Мембрана натянута на одной стороне герметического сосуда, так что на нее действуют одновременно и ее натяжение T и избыток давления воздуха внутри сосуда.