

Г л а в а 6

ТЕОРИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ И ОСНОВАНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. На ранней стадии развития квантовой механики основное внимание было уделено определению уровней энергии, вероятностей спонтанных переходов и т. д.; затем все большее внимание стало уделяться принципиальным вопросам и отысканию физического истолкования матриц, операторов и собственных функций. Такое истолкование дается *статистической интерпретацией квантовой механики*, в развитии которой существенную роль сыграли Борн, Дирак, Гейзенберг, Йордан и Паули.

В то время как в классической механике для описания системы с f степенями свободы необходимо $2f$ чисел (f пространственных координат и f импульсных координат), квантовая механика описывает состояние такой системы нормированной волновой функцией $\varphi(x_1, \dots, x_f)$ [$(\varphi, \varphi) = 1$], аргументами которой являются пространственные координаты. Точно так же, как классическая теория определяет состояние $2f$ произвольными числами, *квантовая теория определяет состояние волновой функцией, удовлетворяющей одному ограничению:*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int |\varphi(x_1, x_2, \dots, x_f)|^2 dx_1 \dots dx_f = 1.$$

Это состояние может быть собственной функцией уравнения Шредингера или линейной комбинацией таких собственных функций. Таким образом, множество состояний гораздо обширнее в квантовой механике, чем в классической теории.

Эволюция системы во времени определяется в классической механике уравнениями движения Ньютона, а в квантовой механике — зависящим от времени уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi, \quad (6.1)$$

где H — гамильтониан. В простейшем случае H имеет вид

$$H = - \sum_{k=1}^f \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + V(x_1, \dots, x_f). \quad (6.2)$$

Разумеется, точное определение оператора \mathbf{H} является наиболее важной задачей квантовой механики.

В классической механике $2f$ чисел, служащих для описания состояния, непосредственно дают координаты и скорости отдельных частиц, посредством которых можно без труда вычислить произвольные функции этих величин. В квантовой механике вопрос о положении частицы в общем случае не имеет смысла. Можно лишь говорить о вероятности, с которой частица может быть найдена в определенном месте. То же самое относится к импульсу и к функциям этих величин, как, например, энергии.

Всем величинам, имеющим физический смысл, соответствуют квантовомеханические эрмитовы операторы. Так, например, оператором, соответствующим координате x_k , является „умножение на x_k “, оператором импульса является $-i\hbar(\partial/\partial x_k)$, оператором энергии, согласно (6.2), является \mathbf{H} и т. д. Последний оператор играет особую роль, поскольку он входит в зависящее от времени уравнение Шредингера.

В общем случае эти операторы получаются путем замены в классическом выражении физической величины, как функции координат и импульсов, пространственных координат x_k оператором „умножения на x_k “, а импульсных координат p_k оператором $-i\hbar(\partial/\partial x_k)$. Например, энергия классического гармонического осциллятора равна

$$\frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \frac{K}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2).$$

В квантовой механике она заменяется оператором

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + \frac{K}{2}(x_1 \cdot x_1 + x_2 \cdot x_2 + x_3 \cdot x_3).$$

Этот оператор имеет как раз вид (6.2).

Измерение некоторой величины (координаты, энергии) может в общем случае дать только такое значение, которое является собственным значением соответствующего оператора. Так, например, возможными уровнями энергии являются собственные значения оператора \mathbf{H} . Какова вероятность того, что величина, представляемая оператором G , имеет значение λ_k , если система находится в состоянии $\psi(x_1, \dots, x_f)$? Эта вероятность равна нулю, если λ_k не является собственным значением оператора G ; с другой стороны, если λ_k есть собственное значение и если ψ_k есть соответствующая нормированная собственная функция, то

$$|(\varphi, \psi_k)|^2 = |(\psi_k, \varphi)|^2 \quad (6.3)$$

дает искомую вероятность.

Согласно статистической интерпретации, могут быть вычислены только вероятности возможных исходов измерений; результат изме-

рения или опыта в общем случае не может быть предсказан с достоверностью.

Если φ разложена по полной ортогональной системе собственных функций оператора \mathbf{G} , т. е.

$$\varphi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 + \dots, \quad (6.4)$$

и если

$$\mathbf{G} \psi_k = \lambda_k \psi_k, \quad (6.4a)$$

то (6.3) показывает, что вероятность того, что в результате измерения будет получено значение λ_k , равна как раз квадрату абсолютного значения $|a_k|^2$ величины

$$(\psi_k, \varphi) = a_k. \quad (6.5)$$

Конечно, сумма вероятностей всех возможных значений $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, должна быть равна единице. Это значит, что

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 + \dots = 1.$$

То, что это действительно имеет место, следует из нормировки функции φ :

$$\begin{aligned} (\varphi, \varphi) &= \left(\sum_k a_k \psi_k, \sum_l a_l \psi_l \right) = \sum_{k, l} a_k^* a_l (\psi_k, \psi_l) = \\ &= \sum_{k, l} a_k^* a_l \delta_{kl} = \sum_k |a_k|^2 = 1. \end{aligned}$$

Волновая функция $c\varphi$ (с $|c| = 1$) соответствует тому же состоянию, что и волновая функция φ ; поэтому *волновая функция определяется физическим состоянием только с точностью до множителя с модулем единица*. Все вероятности, вычисленные с помощью волновой функции φ , совпадают с вероятностями, найденными с помощью волновой функции $c\varphi$, как это непосредственно видно из соотношений

$$|(\psi_k, c\varphi)|^2 = |c(\psi_k, \varphi)|^2 = |c|^2 |(\psi_k, \varphi)|^2 = |(\psi_k, \varphi)|^2.$$

Поскольку эти вероятности являются единственными физически реальными характеристиками состояния, то состояния, описываемые этими двумя волновыми функциями, с физической точки зрения совпадают.

Если одному и тому же собственному значению λ_k принадлежат несколько линейно независимых собственных функций $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \psi_{k3}, \dots$ (которые предполагаются взаимно ортогональными), то вероятность для λ_k равна сумме квадратов коэффициентов разложения:

$$|(\psi_{k1}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k2}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k3}, \varphi)|^2 + \dots$$

Предшествующее обсуждение относится только к вероятностям дискретных собственных значений. Вероятность вполне определенного собственного значения непрерывного спектра всегда равна нулю, поскольку в непрерывном спектре только конечные области могут иметь конечные вероятности. Если рассматриваемая область достаточно мала, эта вероятность равна квадрату абсолютной величины коэффициента разложения нормированного собственного дифференциала, принадлежащего к этой области.

2. Только в одном случае выражение для вероятности, вычисленное с помощью квантовой механики, выражается во вполне определенное утверждение; это тот случай, когда волновая функция состояния φ является собственной функцией оператора G , соответствующего измеряемой физической величине, так что $G\varphi = \lambda_k \varphi$. Тогда φ ортогональна всем собственным функциям оператора G , не принадлежащим λ_k , и вероятность этих собственных значений равна нулю. Поэтому вероятность для λ_k равна 1. В этом случае измерение дает значение λ_k с достоверностью.

Если в результате измерения некоторой величины мы нашли, что она имеет определенное значение, мы должны получить то же самое значение при достаточно быстром повторении измерения. В противном случае утверждение, которое делается на основании измерения, что рассматриваемая величина имеет то или иное значение, не имело бы смысла. Вероятность при повторном измерении, а также *волновая функция*, существующая только для вычисления вероятностей, *меняется в течение измерения*¹⁾. В самом деле, волновая функция после измерения, давшего собственное значение λ_k для G , должна быть собственной функцией оператора G , принадлежащей к λ_k . Только в этом случае повторное измерение G даст наверняка снова значение λ_k . При измерении величины, изображаемой оператором G , волновая функция возмущается и переходит в некоторую собственную функцию оператора G , в частности в ψ_k , если измерение имело результатом λ_k .

В общем случае невозможно предсказать с достоверностью, какой именно собственной функцией оператора G станет волновая функция состояния системы; квантовая механика дает лишь вероятность $|\langle \psi_k, \varphi \rangle|^2$ для определенной собственной функции ψ_k и собственного значения λ_k . Так как вероятность перехода волновой функции φ в ψ_k при измерении величины G может быть вычислена с помощью двух волновых функций φ и ψ_k выражением $|\langle \psi_k, \varphi \rangle|^2$,

1) Таким образом, волновая функция меняется двояким, существенно различным образом. Во-первых, она непрерывно меняется со временем, согласно дифференциальному уравнению (6.1), и, во-вторых, — скачком во время измерений, производимых над системой в определенные моменты времени, согласно законам теории вероятностей (см. последующее обсуждение).

эту величину называют вероятностью перехода из состояния φ в состояние ψ_k . Если известна вероятность перехода волновой функции во всякую функцию, то тем самым задана вероятность всех мыслимых опытов.

С точки зрения вышеизложенного особенно важно заметить, что вероятность перехода имеет физический смысл и поэтому должна иметь одно и то же значение при двух эквивалентных описаниях одной и той же системы.

3. *Переход к новой „системе координат“.* Пусть $G, G', G'' \dots$ — операторы, соответствующие различным физическим величинам, как энергии, импульсу, координате и т. д., а $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — волновые функции различных состояний. Тогда те же самые результаты, которые получаются с помощью этой системы операторов и волновых функций, можно получить с помощью системы операторов

$$\bar{G} = UGU^{-1}, \quad \bar{G}' = UG'U^{-1}, \quad \bar{G}'' = UG''U^{-1}, \dots$$

и волновых функций

$$\bar{\varphi}_1 = U\varphi_1, \quad \bar{\varphi}_2 = U\varphi_2, \quad \bar{\varphi}_3 = U\varphi_3, \dots,$$

где U — произвольный унитарный¹⁾ оператор. Прежде всего, собственные значения, определяющие возможные результаты измерений величин G и $\bar{G} = UGU^{-1}$, совпадают, так как собственные значения не меняются при преобразовании подобия. Если λ_k есть некоторое собственное значение оператора G , а ψ_k — соответствующая собственная функция, то λ_k также является собственным значением оператора $\bar{G} = UGU^{-1}$, а соответствующая собственная функция равна $U\psi_k$. Чтобы показать это, заметим, что из $G\psi_k = \lambda_k\psi_k$ следует, что

$$\bar{G}U\psi_k = UGU^{-1}U\psi_k = UG\psi_k = U\lambda_k\psi_k = \lambda_kU\psi_k.$$

Кроме того, вероятности этого собственного значения λ_k для величины, соответствующей оператору G в первой „системе координат“ и оператору \bar{G} — во второй, равны для этих двух случаев. В первом случае эта вероятность равна

$$|(\psi_k, \varphi)|^2.$$

¹⁾ Унитарность оператора U определяется аналогично определению эрмитовости: требуется, чтобы для двух произвольных функций f и g $(f, g) = (Uf, Ug)$.

Если f и g являются векторами, то U есть матрица, и определение сводится к обычному (необходимому и достаточному) условию унитарности.

Во втором случае φ заменяется на $U\varphi$, а ψ_k — на собственную функцию оператора \bar{G} , соответствующую λ_k , т. е. функцию $U\psi_k$. Таким образом, для вероятности во второй „системе координат“ получаем

$$|(U\psi_k, U\varphi)|^2,$$

что совпадает с выражением, полученным выше, в силу унитарности оператора U . Аналогично, вероятности перехода между парами соответствующих состояний φ_1, φ_2 и $U\varphi_1, U\varphi_2$ также одинаковы в двух системах координат, так как из равенства

$$(U\varphi_1, U\varphi_2) = (\varphi_1, \varphi_2)$$

следует

$$|(U\varphi_1, U\varphi_2)|^2 = |(\varphi_1, \varphi_2)|^2.$$

Такой переход к другой системе координат путем преобразования подобия для операторов и одновременной замены волновой функции φ на $U\varphi$ называется *каноническим преобразованием*. *Два описания, получающиеся одно из другого каноническим преобразованием, эквивалентны*. Наоборот, в гл. 20 будет показано, что два квантовомеханических описания, которые эквивалентны друг другу, могут быть преобразованы друг в друга с помощью канонического преобразования (кроме случая, когда имеет место обращение времени, обсуждаемое в гл. 26).

4. Применение теории преобразований и статистической интерпретации мы проследим на одном примере. Возьмем для этой цели доказательство Шредингером физического значения квадрата абсолютной величины матричного элемента

$$(x_1 + x_2 + \dots + x_N)_{FE} = (\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E) = X_{FE}, \quad (6.6)$$

где $N = f/3$ — число электронов, а x_1, x_2, \dots, x_N — их x -координаты. Согласно матричной теории, этот матричный элемент определяет вероятность перехода, вызванного излучением, поляризованным вдоль оси x , из стационарного состояния ψ_E в стационарное состояние ψ_F . Индексы E и F обозначают энергии этих двух стационарных состояний:

$$H\psi_E = E\psi_E, \quad H\psi_F = F\psi_F. \quad (6.7)$$

Понятие о переходах, вызванных излучением, не имеет ничего общего с переходами, вызванными измерением и обсуждавшимися выше. Последние возникают в силу логической структуры статистической интерпретации и приводят к несколько парадоксально вынуждающей вероятности существования состояния φ' , если состояние системы есть φ . Она является безразмерной величиной. Излагаемые

здесь соображения дадут вероятность того, что в течение последующей секунды атом претерпит переход из состояния ψ_E в состояние ψ_F путем поглощения светового кванта с энергией $\hbar\omega = F - E$. Эта вероятность имеет размерность, обратную времени, и имеет смысл только для переходов между двумя стационарными состояниями (собственными функциями гамильтониана H), в то время как первая была определена для произвольных состояний φ и φ' . Поскольку вероятность индуцированного перехода относится к процессу, развивающемуся во времени, она должна подчиняться зависящему от времени уравнению Шредингера.

В действительности, последнее утверждение не вполне справедливо, так как зависящее от времени уравнение Шредингера не может объяснить спонтанного излучения. Согласно этому уравнению, атомы стабильны в течение сколь угодно долгого времени даже в возбужденных состояниях (таких, как ψ_F), потому что $\varphi = \psi_F \exp[-i(F/\hbar)t]$ является решением уравнения (6.1). Тем не менее уравнение Шредингера охватывает процесс поглощения (так же как и индуцированное излучение), так что мы должны получать правильные результаты, коль скоро спонтанное излучение не играет существенной роли, т. е. до тех пор, пока атом находится почти полностью в основном состоянии ψ_E . Мы увидим позднее, что то же предположение понадобится для завершения вычислений; оно справедливо, если атом первоначально находился в наимизшем состоянии ψ_E , если рассмотрение ограничено сравнительно короткими промежутками времени и если интенсивность падающего света не является слишком большой (что трудно осуществимо на практике).

Рассмотрим теперь процесс поглощения. Предположим, что в момент $t = 0$ система находилась в состоянии $\varphi(0) = \psi_E$; затем состояние меняется согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi = (H_0 + H_1)\varphi, \quad (6.8)$$

где член H_0 — гамильтониан в отсутствие падающего излучения, а H_1 — дополнительный оператор, включающий излучение. Излучение является просто переменным электрическим полем

$$\mathcal{E}_x = P \sin \omega t, \quad \mathcal{E}_y = 0, \quad \mathcal{E}_z = 0. \quad (6.9)$$

Зависимостью напряженности поля от координат можно пренебречь в силу того, что размеры атома малы. Таким образом, потенциальная энергия в (6.2) должна быть заменена на

$$V + H_1 = V + e(x_1 + x_2 + \dots + x_N)P \sin \omega t. \quad (6.8a)$$

Зависимость волновой функции от времени, которая имела бы вид

$$\varphi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (6.10)$$

если бы P было равно нулю, видоизменяется дополнительным потенциалом, рассматриваемым как возмущение. Уравнение для φ записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_0 \varphi + (eP \sin \omega t) (x_1 + x_2 + \dots + x_N) \varphi. \quad (6.11)$$

Чтобы решить это уравнение, разложим φ по полной системе собственных функций оператора H_0 :

$$\varphi(t) = a_E(t) \psi_E + a_F(t) \psi_F + a_G(t) \psi_G + \dots, \quad (6.12)$$

где коэффициенты a_E, a_F, a_G, \dots не зависят от координат x_1, x_2, \dots, x_N , а функции $\psi_E, \psi_F, \psi_G, \dots$ не зависят от времени. Тогда состояние может быть охарактеризовано коэффициентами разложения a_E, a_F, a_G, \dots , вместо волновой функции φ .

Квадраты модулей этих величин, $|a_E|^2, |a_F|^2, |a_G|^2, \dots$ дают вероятности различных возбужденных состояний атома. Если атом не возбужден световой волной, эти вероятности не меняются во времени, и, поскольку вначале только $|a_E|^2 = 1$ было отличным от нуля, то же самое остается справедливым и все время. С другой стороны, если световая волна падает на атом, возбуждаются также более высокие состояния. Вычислим интенсивность такого возбуждения. Для этого предположим, что при $t = 0$

$$a_E(0) = 1, \quad a_F(0) = 0, \quad a_G(0) = 0, \dots$$

и что частота света ω приближенно дается частотой, соответствующей энергии перехода,

$$F - E = \hbar\omega. \quad (6.E.1)$$

Если выражение (6.12) для φ подставить в (6.11), получим дифференциальное уравнение для временной зависимости коэффициентов a_E, a_F, a_G, \dots . Так как мы интересуемся возбуждением первого возбужденного состояния ψ_F , составим скалярное произведение этого уравнения на ψ_F ; тогда в левой части остается лишь член с a_F в силу ортогональности собственных функций оператора H_0 [см. (4.12), (4.12a)], и мы получим

$$i\hbar \frac{\partial a_F(t)}{\partial t} = Fa_F + (Pe \sin \omega t) (X_{FE} a_E + X_{FF} a_F + X_{FG} a_G + \dots), \quad (6.13)$$

где мы подставили (6.6):

$$(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N) \psi_E) = X_{FE}$$

Два члена в правой части (6.13) имеют совершенно различный порядок величины. Энергия E имеет порядок величины в несколько электронвольт. С другой стороны, лишь в очень интенсивномлуче монохроматического света амплитуда электрического вектора P достигает величины 10^{-2} в/см. Матричные элементы величины X равны примерно 10^{-8} см, так что $PeX \approx 10^{-10}$ в. Поэтому мы можем написать

$$a_E = \exp\left(-t \frac{E}{\hbar} t\right), \quad a_F = 0, \quad a_G = 0, \dots$$

во втором члене в правой части (6.13). Поскольку этот член уже мал, подставим в него приближенную волновую функцию (6.10). Она в свою очередь получается при полном пренебрежении возмущением в правой части уравнения (6.13). Это дает

$$i\hbar \frac{\partial a_F(t)}{\partial t} = Fa_F(t) + PeX_{FE} \sin \omega t \exp\left(-t \frac{E}{\hbar} t\right). \quad (6.14)$$

Для интегрирования этого уравнения мы сделаем подстановку

$$a_F(t) = b(t) \exp\left(-t \frac{F}{\hbar} t\right).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \exp\left(-t \frac{E}{\hbar} t\right) i\hbar \frac{\partial b(t)}{\partial t} &= \\ &= \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \exp\left[-t \left(\frac{E}{\hbar} + \omega\right) t\right] - \exp\left[-t \left(\frac{E}{\hbar} - \omega\right) t\right] \right\}, \end{aligned}$$

откуда, умножая на $\exp\left(t \frac{E}{\hbar} t\right)$ и интегрируя, получаем

$$i\hbar b(t) = \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-t \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right]}{-i \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} - \frac{\exp\left[-t \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right]}{-i \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} + C \right\}.$$

Постоянная интегрирования определяется условием $b(0) = 0$. Тогда выражение для $b(t)$ может быть разбито на две части:

$$\begin{aligned} b(t) = \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-t \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right] - 1}{\hbar\omega - F + E} + \right. \\ \left. + \frac{\exp\left[-t \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right] - 1}{\hbar\omega + F - E} \right\}. \quad (6.15) \end{aligned}$$

Это выражение действительно обращается в нуль при $t = 0$, как и следовало ожидать; мы видим также, что $b(t)$ является суммой двух периодических функций.

Если интенсивность света P^2 будет оставаться постоянной, а частота будет меняться, то первый член суммы (6.15) становится очень большим, когда энергия $\hbar\omega$ приближенно равна $F - E$. Заметное возбуждение происходит вообще только тогда, когда это условие соблюдено. Это объясняет условие частот Бора: частота света, осуществляющего заданный переход из состояния с энергией E в состояние с энергией F , должна удовлетворять условию (6.E.1); а именно, $\hbar\omega \approx (F - E)$.

В силу этого условия в дальнейшем можно пренебречь вторым членом выражения (6.15) по сравнению с первым. Для вероятности $|a_F(t)|^2 = |b(t)|^2$ состояния F теперь получаем

$$|b(t)|^2 = \frac{P^2 e^2}{2} |X_{FE}|^2 \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F - E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}. \quad (6.15a)$$

5. До сих пор мы предполагали, что световая волна, падающая на атом в момент $t = 0$, имеет чисто синусоидальную форму. В действительности свет состоит обычно из суперпозиции синусоидальных волн с частотами, покрывающими интервал, примерно симметричный вокруг $\omega = (F - E)/\hbar$ и со случайно распределенными фазами. Ввиду случайности фаз можно предположить, что действие этих накладывающихся друг на друга волн складывается; тогда полная вероятность того, что в момент времени t атом окажется в состоянии F , равна

$$|b(t)|^2 = \sum_{\omega} |X_{FE}|^2 \frac{P_{\omega}^2 e^2}{2} \cdot \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F - E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}, \quad (6.16)$$

где ω пробегает все частоты падающего света, а P_{ω} — амплитуда колебания с частотой ω .

Если частоты падающего излучения плотно группируются в малой области, симметричной относительно $(F - E)/\hbar = \omega$ и ограниченной, например, частотой ω_2 сверху и ω_1 снизу, то можно написать, что $P_{\omega}^2 = 4Jd\omega$, где J — интенсивность (плотность энергии) света на единичный интервал частоты $\omega/2\pi$, а $d\omega$ — бесконечно малый интервал частоты ω . Тогда (6.16) становится интегралом.

$$|b(t)|^2 = 2e^2 J |X_{FE}|^2 \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F - E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2} d\omega, \quad (6.16a)$$

который после введения новой переменной интегрирования

$$x = t \left(\omega - \frac{F - E}{\hbar} \right)$$

приводится к виду

$$|b(t)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} e^2 Jt |X_{FE}|^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx. \quad (6.166)$$

Тогда новые пределы интегрирования будут равны

$$x_1 = t \left(\omega_1 - \frac{F - E}{\hbar} \right), \quad x_2 = t \left(\omega_2 - \frac{F - E}{\hbar} \right). \quad (6.E.2)$$

Однако, поскольку подынтегральное выражение в (6.166) дает наибольший вклад в узкой области около $x = 0$, интегрирование может быть распространено на интервал от $-\infty$ до $+\infty$. Вероятность состояния с энергией F тогда приобретает вид

$$|b(t)|^2 = \frac{2\pi e^2 Jt}{\hbar^2} |X_{FE}|^2. \quad (6.17)$$

Распространение области интегрирования на бесконечный интервал законно только в том случае, если x_1 и x_2 велики, откуда, согласно (6.E.2), следует, что падающий свет должен покрывать область частот с обеих сторон от $\omega = (F - E)/\hbar$, большую по сравнению с $1/t$. С другой стороны, наш расчет может считаться справедливым только для времен, малых по сравнению со временем жизни τ состояния F . Это значит, что ширина линии падающего света должна быть, по предположению, велика по сравнению с „естественной шириной“ \hbar/τ .

Вероятность того, что атом окажется в состоянии с энергией F , пропорциональна, согласно (6.17), интенсивности падающего света, квадрату матричного элемента $|X_{FE}|^2$ — что подтверждает предсказание матричной механики — и длительности t световой волны, как и следовало ожидать. Замечаем снова, что (6.17) справедливо лишь для времен, коротких по сравнению со временем жизни возбужденного состояния и длинных по сравнению с величиной, обратной ширине полосы частот падающего света.

Несмотря на это и на свою приближенность, соотношение (6.17) дает прекрасное подтверждение предположения, что $|a_F|^2$ является интенсивностью возбуждения состояния с энергией F . Вместе с понятием о волновых пакетах в конфигурационном пространстве, это выражение образует исключительно сильную основу для статистической интерпретации квантовой механики. Кроме того, (6.17)

также показывает, что величина

$$|X_{FE}|^2 = |(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E)|^2$$

пропорциональна вероятности перехода, вызванного светом, поляризованным вдоль оси x , из стационарного состояния ψ_E в стационарное состояние ψ_F . Эти результаты, которые были также получены при значительно более общих предположениях, чем рассмотренных здесь, образуют основу для вычисления интенсивностей (или отношений интенсивностей) спектральных линий.