Глава 20

СПИН ЭЛЕКТРОНА

Физические основы теории Паули

1. В предыдущей главе обсуждались наиболее важные свойства атомных спектров, которые могут рассматриваться без введения спина электрона. Однако многие из менее очевидных характеристик, среди которых наиболее важной, по-видимому, является тонкая структура, не могли быть объяснены, так как они тесно связаны с иным свойством электрона — его магнитным моментом.

Гипотеза о том, что электрон имеет магнитный момент и момент количества движения („спин"), была выдвинута Гаудсмитом и Уленбеком. Еще до создания квантовой механики они заметили, что невозможно дать полное описание спектров, не приписывая электрону магнитный момент и механический момент: концепция электрона как точечного заряда оказалась недостаточной. Как известно, в классической электродинамике магнит эквивалентен точечному заряду, вращающемуся вокруг оси магнитного момента. Тогда вектор магнитного момента $\boldsymbol{\mu}$ связан с моментом количества движения $\boldsymbol{L}$ соотношением

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\boldsymbol{L}}{2mc} = \eta \boldsymbol{L}, \tag{20.E.1}$$

где e — заряд вращающейся частицы и m — ее масса. Однако, как показали Гаудсмит и Уленбек, соотношение (20.E.1) не применимо к магнитному моменту, обязанному спину, если взять обычные заряд и массу электрона. Вместо этого следует предположить, что момент количества движения равен

$$|\boldsymbol{S}| = \frac{1}{2}\hbar, \tag{20.1}$$

тогда как магнитный момент равен целому магнетону Бора

$$|\boldsymbol{\mu}| = \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{e}{mc}|\boldsymbol{S}| = 2\eta|\boldsymbol{S}|. \tag{20.1a}$$

Квантовая механика электрона со спином показывает, что эти утверждения нельзя понимать буквально. Даже теория Паули требует, что не может быть осуществлен эксперимент, позволяющий

определить направление (в частности, направляющие косинусы) механического или магнитного моментов. Возможно лишь различить между одним направлением и противоположным ему. Следовательно, вопрос о вероятности различных пространственных направлений спина не имеет смысла, т. е. не может быть решен с помощью эксперимента; измерена может быть лишь проекция спина на какое-либо одно направление. Такие измерения, примером которых служит опыт Штерна — Герлаха, могут дать только два ответа: либо спин ориентирован по рассматриваемому направлению, либо он имеет противоположное направление. Возможными экспериментальными результатами для проекции момента количества движения на рассматриваемое направление являются $+\frac{\hbar}{2}$ или $-\frac{\hbar}{2}$. Если при измерении проекции спина на ось Z получен первый результат, то повторное измерение проекции спина на ось Z, выполненное немедленно, *с достоверностью* даст направление $+Z$ и *не* даст $-Z$. С другой стороны, измерение проекции на ось Y дает с равной вероятностью два возможных результата: $+Y$ и $-Y$. Поэтому важно приписать независимые вероятности всем направлениям спина; даже в том случае, когда спин с достоверностью направлен по оси Z $\left(\text{т. е. если проекция момента количества движения на ось } Z \text{ с достоверностью равна } +\frac{\hbar}{2}\right)$, вероятность направления $+Y$ равна $\frac{1}{2}$, а для всех направлений, кроме $-Z$, вероятность отлична от нуля.

Спин приобретает еще более символический характер в релятивистской теории электрона Дирака, как это было подчеркнуто, в частности, Н. Бором. Согласно этой теории (которую мы не будем здесь обсуждать), существование магнитного момента является целиком релятивистским эффектом, который выступает автоматически, когда пространство и время рассматриваются как равноправные.

2. В теории Паули магнитный момент описывается дополнительной координатой s в волновой функции, которая при этом принимает вид $\Phi(x, y, z, s)$. В то время как x, y, z изменяются от $-\infty$ до $+\infty$, координата s может принимать только два значения: -1 и $+1$. Поэтому волновая функция электрона состоит в действительности из двух функций от x, y, z: $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$. То обстоятельство, что переменная s (в противоположность координатам x, y, z) может принимать лишь два значения, отражает тот факт, что компонента спина, например в направлении Z, может иметь лишь два значения $\left(+\frac{\hbar}{2} \text{ и } -\frac{\hbar}{2}\right)$, тогда как координаты, определяющие положение, могут принимать все значения от $-\infty$ до $+\infty$

Скалярное произведение двух функций от x, y, z и s определяется как непосредственное обобщение скалярного произведения, которое мы видели выше. Скалярное произведение двух функций $\varphi(x, y, z)$ и $g(x, y, z)$ было определено как предел суммы

$$\sum_{x, y, z} \varphi(x, y, z)^* g(x, y, z),$$

где суммирование должно распространяться на всю область от $-\infty$ до $+\infty$. Аналогичным образом, скалярное произведение $\Phi(x, y, z, s)$ и $G(x, y, z, s)$ равно

$$\sum_{s=\pm 1} \sum_{x, y, z} \Phi(x, y, z, s)^* G(x, y, z, s), \tag{20.2}$$

где суммирование снова производится по всей области изменения переменных. Переходя к пределу, получаем

$$(\Phi, G) = \sum_{s=\pm 1} \int\int\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, y, z, s)^* G(x, y, z, s)\, dx\, dy\, dz =$$

$$= \int\int\int_{-\infty}^{\infty} [\Phi(x, y, z, -1)^* G(x, y, z, -1) +$$

$$+ \Phi(x, y, z, 1)^* G(x, y, z, 1)]\, dx\, dy\, dz. \tag{20.3}$$

3. Величины, зависящие только от пространственных координат, остаются важным специальным классом физических величин. Эти величины — как координата X или скорость — имеют также смысл в теории, вовсе не рассматривающей спина. Опыты, в которых измеряются эти величины, мы будем называть „бесспиновыми". Сами эти величины соответствуют в теории Паули операторам, *действующим только на декартовы координаты* x, y, z, так что спиновая координата может рассматриваться как параметр.

Уточним понятие оператора, действующего только на некоторые из координат. Всякий оператор $\mathbf{X}$, который может быть применен к функции $f(\xi)$ одной переменной ξ (как, например, дифференцирование по ξ), может быть применен также к функции двух переменных, так как любая функция $F(\xi, \sigma)$ двух переменных может рассматриваться как семейство функций лишь одной переменной ξ; для каждого конкретного значения σ функция $F(\xi, \sigma)$ является функцией только ξ[1]). Если оператор $\mathbf{X}$ применяется ко всем этим функциям от ξ, то для каждого значения σ получается другое семейство функций от ξ. *Это семейство образует тогда*

[1]) Под ξ мы подразумеваем здесь тройку координат x, y, z, а под σ — спиновую координату s.

функцию $\mathsf{X}F(\xi, \sigma)$. Утверждение о том, что X действует только на ξ, означает таким образом, что значение функции $\mathsf{X}F$ в точке ξ, σ зависит только от значений функции $F(\xi', \sigma')$ при $\sigma' = \sigma$.

Пусть $\Psi_k(x, y, z, s)$ — собственная функция оператора H, действующего только на x, y и z. Если λ_k является соответствующим собственным значением, то функция от x, y, z, s

$$\mathsf{H}\Psi_k(x, y, z, s) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, s) = 0 \tag{20.4}$$

должна обращаться в нуль; иначе говоря, должны обращаться в нуль обе функции этого семейства ($s = +1$ и $s = -1$):

$$\mathsf{H}\Psi_k(x, y, z, -1) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, -1) = 0,$$
$$\mathsf{H}\Psi_k(x, y, z, +1) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, +1) = 0.$$

Если при данном λ_k уравнение

$$\mathsf{H}\psi_k(x, y, z) = \lambda_k\psi_k(x, y, z)$$

имеет только одно решение, то как $\Psi_k(x, y, z, +1)$, так и $\Psi_k(x, y, z, -1)$ должны быть кратными $\psi_k(x, y, z)$[1]):

$$\Psi_k(x, y, z, -1) = u_{-1}\psi_k(x, y, z), \quad \Psi_k(x, y, z, 1) = u_1\psi_k(x, y, z),$$
$$\Psi_k(x, y, z, s) = u_s\psi_k(x, y, z). \tag{20.5}$$

Независимо от того, как выбраны u_{-1} и u_1, $u_s\psi_k(x, y, z)$ остается собственной функцией оператора H, принадлежащей собственному значению λ_k. Это показывает, что введение спиновой координаты s превратило собственное значение λ_k в двукратно вырожденное собственное значение, которому принадлежат две линейно независимые и взаимно ортогональные собственные функции

$$\Psi_{k-} = \delta_{s,-1}\psi_k(x, y, z), \tag{20.5а}$$
$$\Psi_{k+} = \delta_{s,1}\psi_k(x, y, z). \tag{20.5б}$$

Скалярное произведение Ψ_{k-} и Ψ_{k+} действительно обращается в нуль, так как один из множителей в каждом члене подынтегральной функции (20.3) равен нулю.

Собственные функции

$$\delta_{s,-1}\psi_1, \ \delta_{s,1}\psi_1, \ \delta_{s,-1}\psi_2, \ \delta_{s,1}\psi_2, \ \delta_{s,-1}\psi_3, \ \ldots$$

---

[1]) Сначала могло бы показаться несколько странным, что s выступает в качестве переменной в левой части этого равенства и в качестве индекса — в правой; но это лишний раз подчеркивает то обстоятельство, что всякая функция x, y, z и s может рассматриваться как соответствие между функцией от x, y и z и каждым значением s.

соответствуют возможным результатам двух измерений, выполняемых одновременно: а) измерения величины, отвечающей оператору H и б) измерения Z-компоненты спина. Для Ψ_{k-} значение первой величины с достоверностью равно λ_k, а спин с достоверностью имеет направление $-Z$, тогда как для Ψ_{k+} первая величина по-прежнему с достоверностью равна λ_k, но спин имеет направление $+Z$, т. е. вероятность обнаружить его в направлении $-Z$ равна нулю. В общем случае, если волновая функция равна

$$\Phi = a_1\Psi_{1-} + a_2\Psi_{2-} + a_3\Psi_{3-} + \ldots + b_1\Psi_{1+} + b_2\Psi_{2+} + b_3\Psi_{3+} + \ldots, \tag{20.6}$$

вероятность того, что H имеет значение λ_k и что спин одновременно имеет направление $-Z$, равна $|a_k|^2$, а вероятность значения λ_k для H и направления спина $+Z$ равна $|b_k|^2$.

Инвариантность описания относительно пространственных вращений

4. При описании электрона волновой функцией, зависящей от s, оси Z отдается предпочтение перед всеми направлениями, даже перед двумя другими осями координат. Поэтому совершенно необходимо исследовать здесь вопрос о том, как изотропность пространства сохраняется при этом описании, т. е. какую волновую функцию $\mathsf{O}_R\Phi$ припишет состоянию Φ второй наблюдатель, если он описывает физическую систему и все величины *точно таким же образом, как и первый*, за исключением того, что он пользуется *системой координат, повернутой* относительно системы координат первого наблюдателя. Пусть относительное расположение двух систем координат таково, что координаты точки x, y, z во второй системе равны

$$\begin{aligned} \mathsf{R}_{xx}x + \mathsf{R}_{xy}y + \mathsf{R}_{xz}z &= x', \\ \mathsf{R}_{yx}x + \mathsf{R}_{yy}y + \mathsf{R}_{yz}z &= y', \\ \mathsf{R}_{zx}x + \mathsf{R}_{zy}y + \mathsf{R}_{zz}z &= z'. \end{aligned}$$

(R является вещественной ортогональной трехмерной матрицей с определителем 1.) Функция $\mathsf{O}_R\Phi$ может быть определена как волновая функция, приписываемая состоянию Φ вторым наблюдателем, или как волновая функция первоначального состояния Φ, повернутого с помощью преобразования R, и обнаруживаемая первым наблюдателем.

Если бы волновая функция зависела только от пространственных координат частиц, оператор O_R был бы просто точечным преобразованием P_R (см. гл. 11):

$$\mathsf{P}_R\varphi(x', y', z') = \varphi(x, y, z). \tag{20.7}$$

Равенство (20.7) утверждает просто, что волновая функция $\mathsf{P}_R\varphi$ для второго наблюдателя в точке x', y', z' принимает то же самое значение, что и волновая функция для первого наблюдателя в точке x, y, z. Это должно быть верно, так как точку x, y, z второй наблюдатель называет x', y', z'.

При включении спиновых координат, наряду с пространственными, преобразование O_R не может оставаться просто точечным преобразованием, так как s нельзя подвергнуть точечному преобразованию. По этой причине O_R будет более общим оператором, чем P_R. Предположим, что существует система операторов O_R (каждому вращению R принадлежит некоторый оператор O_R), и попытаемся найти его, исходя из основных предположений теории Паули и требования равноправности наблюдателей, связанных с различными системами координат. Мы найдем, что *существует только одна система операторов, удовлетворяющих этим условиям*. Ее определение позволит сделать важные заключения о свойствах электрона со спином.

5. Описание второго наблюдателя, который приписывает состоянию Φ волновую функцию $\mathsf{O}_R\Phi$, должно быть вполне эквивалентным первоначальному описанию. В частности, оно должно давать те же самые *вероятности переходов* между двумя произвольными состояниями Ψ и Φ, какие даются первым:

$$|(\Psi, \Phi)|^2 = |(\mathsf{O}_R\Psi, \mathsf{O}_R\Phi)|^2. \tag{20.8}$$

Здесь важно заметить, что, хотя *состояние* Φ, которое представляется как состояние $\mathsf{O}_R\Phi$ для наблюдателя, связанного с повернутой системой координат, задано полностью указанием его волновой функции, волновая функция второго наблюдателя для этого состояния не определена однозначно. Она может быть умножена на произвольную постоянную c, имеющую абсолютное значение 1, так как волновые функции $\mathsf{O}_R\Phi$ и $c\mathsf{O}_R\Phi$ описывают одно и то же физическое состояние. Это означает, что оператор O_R не является однозначным — для всякой функции Φ в O_R имеется свободный множитель. Будет показано (см. приложение в конце настоящей главы), что этим произволом в O_R можно воспользоваться так, чтобы для всех Ψ и Φ имели место соотношения

$$\left.\begin{aligned} &(\Psi, \Phi) = (\mathsf{O}_R\Psi, \mathsf{O}_R\Phi) \\ \text{и}\quad &\mathsf{O}_R(a\Psi + b\Psi) = a\mathsf{O}_R\Psi + b\mathsf{O}_R\Psi \end{aligned}\right\} \tag{20.8a}$$

(a и b — постоянные); иначе говоря, *так, чтобы* O_R *стал линейным оператором*. Тогда два способа описания — один для наблюдателя в первоначальной системе и другой для наблюдателя в повернутой системе координат — *отличаются только каноническим преобразованием*, что обеспечивает их полную физическую эквива-

лентность. Второй наблюдатель воспринимает состояние с волновой функцией Φ как $\mathsf{O}_R\Phi$; величине, которая соответствует оператору H для первого наблюдателя, соответствует оператор $\mathsf{O}_R\mathsf{H}\mathsf{O}_R^{-1}$ с точки зрения второго наблюдателя.

Наоборот, требование (20.8а), чтобы O_R был линейным унитарным оператором, определяет постоянную c_Φ однозначно для всех волновых функций, кроме одной. Если $c\mathsf{O}_R\Phi$ подставить вместо волновой функции $\mathsf{O}_R\Phi$, то для сохранения в силе соотношений (20.8а) все волновые функции должны быть одновременно умножены на c. Чтобы убедиться в этом, подставим $c\mathsf{O}_R\Phi$ вместо $\mathsf{O}_R\Phi$ в (20.8а), оставив неизменной, скажем, $\mathsf{O}_R\Psi$; тогда, если (20.8а) должно выполняться для этой новой системы, то

$$(\Psi, \Phi) = (\mathsf{O}_R\Psi, c\mathsf{O}_R\Phi) = c(\mathsf{O}_R\Psi, \mathsf{O}_R\Phi),$$

откуда вместе с (20.8а) следует, что $c = 1$. В дальнейшем мы всегда будем выбирать функцию $\mathsf{O}_R\Phi$ так, чтобы (20.8а) выполнялось; тогда для всех волновых функций $\mathsf{O}_R\Phi$ (где R — заданное вращение) остается свободной лишь *одна константа*. Эта константа может, однако, зависеть от R.

6. Рассмотрим теперь два состояния $\Psi_- = \psi(x, y, z)\delta_{s,-1}$ и $\Psi_+ = \psi(x, y, z)\delta_{s,+1}$. Для „бесспиновых" опытов оба эти состояния ведут себя так, как если бы их волновые функции были равны $\psi(x, y, z)$. Поэтому пока рассматриваются „бесспиновые" опыты, для наблюдателя в повернутой системе координат они представляются как состояние с волновой функцией $\mathsf{P}_R\psi(x, y, z)$. Поэтому, согласно (20.5), волновые функции $\mathsf{O}_R\Psi_-$ и $\mathsf{O}_R\Psi_+$ должны иметь вид

$$\begin{aligned} \mathsf{O}_R\delta_{s,-1}\psi(x, y, z) &= \mathbf{u}_{s,-1}\mathsf{P}_R\psi(x, y, z), \\ \mathsf{O}_R\delta_{s,1}\psi(x, y, z) &= \mathbf{u}_{s,1}\mathsf{P}_R\psi(x, y, z), \end{aligned} \tag{20.9}$$

где $\mathbf{u}_{s,-1}$ и $\mathbf{u}_{s,1}$ не зависят от x, y, z и на данном этапе могут быть различными для разных ψ. Однако, если φ является состоянием, отличным от ψ, для которого справедливо соотношение

$$\mathsf{O}_R\delta_{s,-1}\varphi(x, y, z) = \bar{\mathbf{u}}_{s,-1}\mathsf{P}_R\varphi(x, y, z),$$

то из линейности оператора O_R следует, что

$$\begin{aligned} \mathsf{O}_R\delta_{s,-1}(\varphi+\psi) = \bar{\bar{\mathbf{u}}}_{s,-1}\mathsf{P}_R(\varphi+\psi) &= \bar{\bar{\mathbf{u}}}_{s,-1}\mathsf{P}_R\varphi + \bar{\bar{\mathbf{u}}}_{s,-1}\mathsf{P}_R\psi = \\ &= \mathsf{O}_R\delta_{s,-1}\varphi + \mathsf{O}_R\delta_{s,-1}\psi = \bar{\mathbf{u}}_{s,-1}\mathsf{P}_R\varphi + \mathbf{u}_{s,-1}\mathsf{P}_R\psi. \end{aligned}$$

В силу линейной независимости $\mathsf{P}_R\varphi$ и $\mathsf{P}_R\psi$ отсюда следует, что

$$\bar{\mathbf{u}}_{s,-1} = \bar{\bar{\mathbf{u}}}_{s,-1} = \mathbf{u}_{s,-1}.$$

Аналогичным образом,

$$\bar{\mathbf{u}}_{s,\,\mathrm{I}} = \mathbf{u}_{s,\,\mathrm{I}}.$$

Таким образом, величины $\mathbf{u}_{st}$ одинаковы для всех волновых функций, а матрица $\mathbf{u} = \mathbf{u}(R)$ может зависеть только от вращения R. Если $\Phi(x, y, z, s)$ является произвольной волновой функцией

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s,\,-\mathrm{I}}\Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,\,\mathrm{I}}\Phi(x, y, z, 1), \qquad (20.10)$$

то из линейности оператора $\mathbf{O}_R$ и соотношений (20.9) снова следует, что

$$\mathbf{O}_R\Phi(x, y, z, s) = \mathbf{O}_R\delta_{s,\,-\mathrm{I}}\Phi(x, y, z, -1) + \mathbf{O}_R\delta_{s,\,\mathrm{I}}\Phi(x, y, z, 1) = \\ = \mathbf{u}_{s,\,-\mathrm{I}}\mathbf{P}_R\Phi(x, y, z, -1) + \mathbf{u}_{s,\,\mathrm{I}}\mathbf{P}_R\Phi(x, y, z, 1), \qquad (20.11)$$

$$\mathbf{O}_R\Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm\mathrm{I}} \mathbf{u}_{st}\mathbf{P}_R\Phi(x, y, z, t).$$

Таким образом, оператор $\mathbf{O}_R$ может быть разбит на два множителя:

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{Q}_R\mathbf{P}_R. \qquad (20.12)$$

Оператор $\mathbf{P}_R$ является обычным оператором преобразования, определенным равенством (20.7), и действует только на пространственные координаты волновой функции; оператор $\mathbf{Q}_R$ определяется равенством

$$\mathbf{Q}_R\Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm\mathrm{I}} \mathbf{u}(R)_{st}\,\Phi(x, y, z, t) \qquad (20.12\text{a})$$

и действует только на спиновую координату s. Поскольку область изменения s состоит только из двух точек $+1$ и -1, (20.12а) показывает, что оператор $\mathbf{Q}_R$ эквивалентен двухрядной матрице:

$$\mathbf{u}(R) = \begin{pmatrix} \mathbf{u}(R)_{-\mathrm{I},\,-\mathrm{I}} & \mathbf{u}(R)_{-\mathrm{I},\,\mathrm{I}} \\ \mathbf{u}(R)_{\mathrm{I},\,-\mathrm{I}} & \mathbf{u}(R)_{\mathrm{I},\,\mathrm{I}} \end{pmatrix}. \qquad (20.13)$$

Операторы $\mathbf{P}$ и $\mathbf{Q}$ коммутируют; поэтому для двух произвольных вращений R и S имеем

$$\mathbf{P}_S\mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R\mathbf{P}_S \qquad (20.14)$$

и, в частности,

$$\mathbf{P}_R\mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R\mathbf{P}_R.$$

Возможность разбить оператор $\mathbf{O}_R$ на два множителя $\mathbf{P}_R$ и $\mathbf{Q}_R$ опирается главным образом на предположение о том, что существуют „бесспиновые“ опыты, которые могут быть описаны волновой функцией, зависящей только от x, y и z. Это предположение

отбрасывается в релятивистской теории Дирака, и в последней теории O_R не может быть разбит на два множителя, удовлетворяющих (20.14), если R представляет переход к движущейся системе координат.

Связь с теорией представлений

7. Из унитарности операторов O_R и P_R (и, следовательно, также P_R^{-1}) следует, что оператор $\mathsf{Q}_R = \mathsf{O}_R\mathsf{P}_R^{-1}$ должен быть унитарным. Поэтому для любых функций Φ и Ψ

$$(\mathsf{Q}_R\Phi,\ \mathsf{Q}_R\Psi) = (\Phi,\ \Psi). \tag{20.15}$$

Отсюда следует, что матрица $\mathbf{u}(R)$ должна быть унитарной. Если положить $\Phi = \delta_{s\sigma}\psi$ и $\Psi = \delta_{s\tau}\psi$, то, согласно (20.3) (если ψ нормирована), $(\Phi,\ \Psi) = \delta_{\sigma\tau}$. Поэтому в соответствии с (20.15) и (20.12а) имеем

$$\delta_{\sigma\tau} = (\mathsf{Q}_R\delta_{s\sigma}\psi,\ \mathsf{Q}_R\delta_{s\tau}\psi) = (\mathbf{u}_{s\sigma}\psi,\ \mathbf{u}_{s\tau}\psi) =$$

$$= \sum_{s=\pm 1} \int\int_{-\infty}^{+\infty}\int \mathbf{u}^*_{s\sigma}\psi^*\mathbf{u}_{s\tau}\psi\, dx\, dy\, dz = \sum_{s=\pm 1} \mathbf{u}^*_{s\sigma}\mathbf{u}_{s\tau}.$$

Но это равенство и является в точности условием унитарности матрицы $\mathbf{u}$.

Кроме того, поскольку O_R определяется физическими требованиями и соотношениями (20.8а) лишь с точностью до постоянного множителя с абсолютной величиной 1, зависящего от R, можно заменить O_R на $c_R\mathsf{O}_R$, не меняя физического содержания теории и не видоизменяя соотношений (20.8а) (где $|c_R| = 1$). Множитель c_R может быть включен в оператор Q_R, т. е. в $\mathbf{u}(R)$; тем самым можно обеспечить, *чтобы определитель матрицы* $\mathbf{u}(R)$ *был равен* $+1$.

Наконец, чтобы полностью определить матрицу $\mathbf{u}(R)$, учтем, что $\mathsf{O}_R\Phi$ есть волновая функция состояния Φ, повернутого на R, а $\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R\Phi$ — волновая функция этого состояния, повернутого сначала на R, а затем на S, или в целом — на SR. Таким образом, оператор $\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R$ физически полностью эквивалентен оператору O_{SR}. Так как он тоже удовлетворяет соотношениям (20.8а) — произведение двух линейных унитарных операторов снова линейно и унитарно, — то он может отличаться от O_{SR} лишь постоянным множителем:

$$\mathsf{O}_{SR} = c_{S,R}\mathsf{O}_S\mathsf{O}_R. \tag{20.16}$$

Далее, в силу $\mathbf{P}_{SR}=\mathbf{P}_S\mathbf{P}_R$ и соотношения (20.14), из (20.12) следует, что

$$\mathbf{Q}_{SR}\mathbf{P}_{SR}=c_{S,R}\mathbf{Q}_S\mathbf{P}_S\mathbf{Q}_R\mathbf{P}_R, \quad \mathbf{Q}_{SR}=c_{S,R}\mathbf{Q}_S\mathbf{Q}_R$$

или, с учетом (20.12а),

$$\sum_{t=\pm 1}\mathbf{u}(SR)_{st}\Phi(x,y,z,t)=c_{S,R}\sum_{r=\pm 1}\sum_{t=\pm 1}\mathbf{u}(S)_{sr}\mathbf{u}(R)_{rt}\Phi(x,y,z,t),$$

$$\mathbf{u}(SR)=c_{S,R}\mathbf{1}\cdot\mathbf{u}(S)\mathbf{u}(R). \tag{20.17}$$

Так как определители всех матриц $\mathbf{u}$ мы нормировали к 1, из (20.17) следует также, что $|c_{S,R}\cdot\mathbf{1}|=1$ и $c_{S,R}=\pm 1$. Таким образом, с точностью до знака, матрицы $\mathbf{u}(R)$ образуют представление трехмерной группы вращений:

$$\mathbf{u}(SR)=\pm\mathbf{u}(S)\mathbf{u}(R). \tag{20.17а}$$

Это наводит на мысль, что либо $\mathbf{u}(R)$ совпадает с матрицами, которые обсуждались в гл. 15,

$$\mathbf{u}(\{\alpha\beta\gamma\})=\mathfrak{D}^{(1/2)}\{(\alpha\beta\gamma\})=\begin{pmatrix} e^{-1/2 i\alpha}\cos\frac{1}{2}\beta e^{-1/2 i\gamma} & -e^{-1/2 i\alpha}\sin\frac{1}{2}\beta e^{1/2 i\gamma} \\ e^{1/2 i\alpha}\sin\frac{1}{2}\beta e^{-1/2 i\gamma} & e^{1/2 i\alpha}\cos\frac{1}{2}\beta e^{1/2 i\gamma}\end{pmatrix}, \tag{20.18}$$

либо по крайней мере получаются из них с помощью преобразования подобия. Это действительно так, и в следующей главе мы покажем, что всякая система двумерных матриц, удовлетворяющих (20.17а), либо состоит из единичных матриц, либо может быть получена из $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ с помощью преобразования подобия. Первая из этих возможностей исключается, так как это означало бы, например, что состояние, в котором спин с достоверностью был направлен по оси Z, обладало бы этим свойством после произвольного вращения.

Матрица $\mathbf{u}$ может быть диагональной матрицей только для вращений с $\beta=0$ (которые оставляют неизменной ось Z); для таких вращений она должна быть диагональной. Действительно, если спин в первой системе координат имеет направление $-Z$, так что $\Phi(x,y,z,1)=0$, то это должно сохраниться и во второй системе координат. Но если это так, из (20.11) следует, что $\mathbf{u}_{1,-1}=0$; аналогичным образом $\mathbf{u}_{-1,1}=0$; значит $\mathbf{u}(\{\alpha 00\})$ есть диагональная матрица. Поскольку $\mathbf{u}$ эквивалентна $\mathfrak{D}^{1/2}(\{\alpha 00\})$, она может быть равна либо

$$\mathbf{u}(\{\alpha 00\})=\begin{pmatrix} e^{-1/2 i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i\alpha}\end{pmatrix}, \quad \text{либо} \quad \begin{pmatrix} e^{1/2 i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-1/2 i\alpha}\end{pmatrix}. \tag{20.E.2}$$

Но из второго выражения следует, что в состоянии $\psi\delta_{s,-1}$ момент количества движения должен иметь направление $+Z$, а в состоянии $\psi\delta_{s,1}$ — направление $-Z$. Мы исключаем этот выбор, так как в этом случае волновая функция $\Phi(x, y, z, -s)$ была бы приписана состоянию, которое мы описываем функцией $\Phi(x, y, z, s)$.

Таким образом, $\mathbf{u}(\{\alpha 00\}) = \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha 00\})$ и унитарная матрица $\mathbf{S}$, преобразующая $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ в $\mathbf{u}$, должна коммутировать с $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha 00\})$; следовательно, она должна быть диагональной матрицей. Пусть ее два диагональных элемента равны a и a' ($|a| = |a'| = 1$). Тогда можно изменить обозначения и приписать волновую функцию $\mathbf{S}\Phi(x, y, z, s)$ состоянию, волновая функция которого ранее равнялась $\Phi(x, y, z, s)$, где

$$\mathbf{S}\Phi(x, y, z, -1) = a\Phi(x, y, z, -1),$$
$$\mathbf{S}\Phi(x, y, z, 1) = a'\Phi(x, y, z, 1).$$

Это допустимо, так как до сих пор мы не придавали никакого значения комплексной фазе отношения $\Phi(x, y, z, -1)/\Phi(x, y, z, 1)$. В описании, возникающем таким путем из первоначального и вполне эквивалентном ему, мы в каждом случае имеем

$$\mathbf{u}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}), \tag{20.18a}$$

и мы находим, что *всякое описание спина, основанное на положениях, обсуждавшихся в п. п. 1, 2 и 3, физически вполне эквивалентно описанию, в котором волновая функция состояния* Φ, *повернутого на* R, *равна*[1] $\mathbf{O}_R\Phi$. Здесь $\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R\mathbf{Q}_R$ является оператором, определенным соотношением

$$\mathbf{O}_R\Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2 s,\, 1/2 t}\mathbf{P}_R\Phi(x, y, z, t) =$$
$$= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2 s,\, 1/2 t}\Phi(x'', y'', z'', t), \tag{20.19}$$

где x'', y'', z'' получаются из x, y, z путем вращения R^{-1}. Матрицы $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ имеют индексы $^1/_2 s$, $^1/_2 t$, так как строки и столбцы $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ обозначены индексами $-^1/_2$ и $+^1/_2$ вместо индексов -1 и $+1$ в случае матрицы $\mathbf{u}$.

Пусть, например,

$$\Phi(x, y, z, s) = (x + iy)\exp(-r/2r_0) \quad \text{при} \quad s = \pm 1 \tag{20.E.3}$$

Функция $(x + iy)\exp(-r/2r_0)$ является, если отвлечься от нормировки, собственной функцией атома водорода с $N = 2$, $l = 1$ и $\mu = +1$ [см. (17.3)]

[1]) Здесь R всегда является чистым вращением.

Рассмотрим состояние (20.E.3) в системе координат, ось Y которой совпадает со старой осью Y, а ось Z является старой осью X. Тогда вращение R имеет вид $\{0, \pi/2, 0\}$ и

$$x' = -z, \quad y' = y, \quad z' = x,$$

а обратным преобразованием является

$$x'' = z, \quad y'' = y, \quad z'' = -x.$$

Матрица $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \pi/2, 0\})$ равна

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Волновая функция состояния (20.E.3) в новой системе координат, согласно (20.19), имеет вид

$$\mathsf{O}_R\Phi(x, y, z, s) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)\, e^{-r/2r_0} - \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)\, e^{-r/2r_0} & \text{при } s=-1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)\, e^{-r/2r_0} + \frac{1}{\sqrt{2}}(z+iy)\, e^{-r/2r_0} & \text{при } s=+1, \end{cases}$$

$$= \delta_{s1}\sqrt{2}(z+iy)\, e^{-r/2r_0}.$$

В новой системе координат спин с достоверностью направлен по оси $+Z$; следовательно, в старой системе спин был с достоверностью направлен по оси $+X$.

8. Получим теперь определенные физические следствия из формул преобразования (20.19). С помощью (20.19) можно ответить на следующий важный вопрос: каковы вероятности того, что измерение проекции спина на ось Z' приведет к результатам $+\hbar/2$ и $-\hbar/2$, если известно, что Z-компонента имеет значение $+\hbar/2$? Иными словами, каково соотношение между вероятностями проекций спина на два направления Z' и Z, составляющие угол β? Если спин ориентирован в направлении Z, то волновая функция имеет вид $\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1}\varphi(x, y, z)$. Если рассматривать это состояние с точки зрения системы координат, повернутой на $\{0, \beta, 0\}$, то в силу соотношения

$$\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1}\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\varphi(x, y, z)$$

[так как $\Phi(x, y, z, -1) = 0$], используя $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \beta, 0\})_{st}$ из (15.16), имеем

$$\mathsf{O}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, -1) = \cos\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{(0\beta 0)}\Phi(x, y, z, -1) -$$

$$-\sin\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, 1) = -\sin\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\varphi(x, y, z), \qquad (20.20)$$

$$\mathsf{O}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, 1) = \sin\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, -1) +$$

$$+\cos\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\Phi(x, y, z, 1) = \cos\frac{1}{2}\beta\mathsf{P}_{\{0\beta 0\}}\varphi(x, y, z).$$

Теперь второй наблюдатель может вычислить вероятность данного значения проекции спина на ось Z', составляющей угол β с первоначальным направлением оси Z, непосредственно пользуясь волновой функцией $\mathbf{O}_{\{0\beta 0\}}\Phi$. Согласно (20.20), вероятность найти спин в направлении $+Z'$ дается выражением $\left|\cos\frac{1}{2}\beta\right|^2$, а вероятность найти спин в направлении $-Z'$ — выражением $\left|\sin\frac{1}{2}\beta\right|^2$. *Если вероятность определенного направления спина равна 1, то для направления, составляющего с ним угол* β, *вероятность равна* $\left|\cos\frac{1}{2}\beta\right|^2$. При $\beta=0$ эта вероятность равна 1, как это и должно быть при совпадении двух направлений; при $\beta=\pi/2$, когда направления взаимно перпендикулярны, она равна $1/2$; при $\beta=\pi$, когда два направления противоположны, эта вероятность равна 0.

Рассмотрим теперь вопрос о том, при каких условиях существует направление, в котором спин с достоверностью *не лежит*. Пусть этим направлением будет, скажем, направление Z', так что волновая функция $\mathbf{O}_{\{\alpha\beta\gamma\}}\Phi$ в системе координат, в которой ось Z совпадает с направлением Z', имеет вид

$$\mathbf{O}_{\{\alpha\beta\gamma\}}\Phi(x, y, z, s)=\delta_{s,-1}\varphi(x, y, z).$$

Сама волновая функция Φ (ради краткости будем писать $R=\{\alpha, \beta, \gamma\}$) имеет вид

$$\Phi(x, y, z, s)=\mathbf{O}_{R^{-1}}\mathbf{O}_R\Phi=\mathbf{O}_{R^{-1}}\delta_{s,-1}\varphi(x, y, z)=$$
$$=\mathfrak{D}^{(1/2)}(R^{-1})_{1/2 s,-1/2}\mathbf{P}_{R^{-1}}\varphi(x, y, z).$$

Следовательно, такое направление будет существовать только в том случае, если $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$ различаются лишь постоянным множителем, не зависящим от x, y, z:

$$\frac{\Phi(x, y, z, -1)}{\Phi(x, y, z, 1)}=\frac{\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{-1/2,-1/2}}{\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2,-1/2}}=e^{-i\alpha}\operatorname{ctg}\frac{1}{2}\beta. \qquad (20.\text{E}.4)$$

Абсолютная величина и комплексная фаза этого множителя остаются, как показывает (20.E.4), совершенно произвольными. То, что $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$ отличаются лишь множителем, показывает, что при одновременном измерении Z-компоненты спина и произвольной, не зависящей от спина величины вероятность для последней, в соответствии с п. 3, *статистически независима* от направления спина. В этом случае всегда существует направление — его азимут α и полярный угол β даются соотношением (20.A.4) — вдоль которого спин с достоверностью не лежит; в противном случае такого направления не существует.

9. Следует еще обратить внимание на то обстоятельство, что далеко идущие конкретные утверждения о поведении электрона со спином могут быть получены на основе одних лишь требований инвариантности и общих принципов квантовой механики, а также некоторых весьма качественных постулатов. Только что полученные два результата, особенно результат, касающийся соотношений между вероятностями различных направлений спина, доступны (по крайней мере в принципе) экспериментальной проверке.

Определение оператора $\mathbf{O}_R$ было дано в предположении, что различные системы координат физически эквивалентны. Внешние поля, нарушающие изотропность пространства, могут также приводить к видоизменению операторов $\mathbf{O}_R$. Разумеется, пока внешнее поле слабо, операторы, осуществляющие переход к повернутым осям, будут по-прежнему приближенно даваться выражением (20.19). Однако в дальнейшем (20.19) будет считаться справедливым и при сильных полях.

Наконец, обратим внимание на одно весьма существенное обстоятельство в выводе (20.19), которое могло быть заслонено математическим формализмом. Это обстоятельство состоит в том, что эквивалентность двух систем координат также влечет за собой эквивалентность операторов $\mathbf{O}_R$, осуществляющих преобразование к сходным образом повернутым системам координат.

Операторы $\mathbf{O}_R$ линейны и унитарны, но они не представляют точечного преобразования, как $\mathbf{P}_R$. По этой причине к ним не применимо соотношение (11.22). Это значит, что

$$\mathbf{O}_R\Phi\Psi \neq \mathbf{O}_R\Phi \cdot \mathbf{O}_R\Psi.$$

Кроме того, следует заметить, что вращение R соответствует не одному, а двум операторам, $\mathbf{O}_R$ и $-\mathbf{O}_R$, так как матрица $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$, входящая в (20.19), определяется вращением лишь с точностью до знака. К тому же равенство $\mathbf{O}_{SR} = \mathbf{O}_S\mathbf{O}_R$ не имеет места; выполняется лишь соотношение

$$\mathbf{O}_{SR} = \pm\, \mathbf{O}_S\mathbf{O}_R. \tag{20.16a}$$

Нет никакой возможности произвольно опустить один из этих операторов $+\mathbf{O}_R$ или $-\mathbf{O}_R$ таким путем, чтобы (20.16a) оставалось справедливым для оставшихся операторов с одним лишь верхним знаком.

10. Проекция спина на ось Z является такой же „физической величиной", как и пространственные координаты или момент количества движения. Тогда, согласно физической интерпретации квантовой механики, она должна соответствовать линейному эрмитовому оператору; этот оператор будем обозначать через $\mathbf{S}_z = (\hbar/2)\,\mathbf{s}_z$. Собственными значениями оператора $\mathbf{s}_z$, соответствующими возможным значениям $-\hbar/2$ и $+\hbar/2$ Z-компоненты спина, являются -1 и $+1$. Собственными функциями, принадлежащими первому собственному значению, являются все функции

$\Psi_-(x, y, z, s) = \delta_{s,-1}\psi(x, y, z)$; они отличны от нуля только при $s = -1$. Второму собственному значению принадлежат все функции $\Psi_+(x, y, z, s) = \delta_{s,1}\psi'(x, y, z)$, отличные от нуля только при $s = +1$. Таким образом

$$\mathbf{s}_z\delta_{s,-1}\psi(x, y, z) = -\delta_{s,-1}\psi(x, y, z),$$
$$\mathbf{s}_z\delta_{s,1}\psi'(x, y, z) = +\delta_{s,1}\psi'(x, y, z);$$

для произвольных функций

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s,-1}\Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1}\Phi(x, y, z, 1)$$

мы имеем

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_z\Phi(x, y, z, s) &= \mathbf{s}_z(\delta_{s,-1}\Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1}\Phi(x, y, z, 1)) = \\ &= -\delta_{s,-1}\Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1}\Phi(x, y, z, 1), \\ \mathbf{s}_z\Phi(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} t\delta_{st}\Phi(x, y, z, t) = s\Phi(x, y, z, s),\end{aligned} \tag{20.21}$$

в силу линейности операторов $\mathbf{s}_z$.

Так как оператор $\mathbf{s}_z$ действует только на спиновые координаты, то, подобно $\mathbf{O}_R$, его матричный вид будет

$$\mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{20.21a}$$

Определим теперь оператор $\mathbf{h}$, соответствующий Z'-компоненте спина Для наблюдателя в системе координат, осью Z которой является Z', этот оператор равен просто $\mathbf{s}_z$, поскольку для этого наблюдателя, по определению, все операторы имеют тот же вид, что и для первого наблюдателя, за исключением того, что они относятся к его собственной системе координат. С другой стороны, этот оператор должен получаться из $\mathbf{h}$ путем преобразования с помощью оператора $\mathbf{O}_R$, так что

$$\mathbf{s}_z = \mathbf{O}_R\mathbf{h}\mathbf{O}_R^{-1}, \quad \mathbf{h} = \mathbf{O}_{R^{-1}}\mathbf{s}_z\mathbf{O}_R.$$

Тогда в силу (20.12) (а также в силу коммутативности $\mathbf{P}_R$ с $\mathbf{s}_z$) следует, что

$$\mathbf{h} = \mathbf{Q}_{R^{-1}}\mathbf{P}_{R^{-1}}\mathbf{s}_z\mathbf{P}_R\mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_{R^{-1}}\mathbf{s}_z\mathbf{Q}_R. \tag{20.22}$$

Если для всех операторов, входящих в (20.22), воспользоваться матричной формой (они действуют только на s), получим

$$\mathbf{h} = \mathbf{u}(R)^\dagger\,\mathbf{s}_z\mathbf{u}(R).$$

Теперь из соотношения (15.11) следует, что наш оператор $\mathbf{h}$ совпадает с матрицей, использованной в этом соотношении, если положить $\bar{\mathbf{h}} = \mathbf{s}_z$ (т. е. $x' = y' = 0$, $z' = 1$). Вектор $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ в равенстве (15.11) представляет собой вектор, компоненты которого получаются из $\boldsymbol{r}'$ (с компонентами $x' = y' = 0$, $z' = 1$) путем преобразования R^{-1} и, следовательно, является единичным вектором в направлении Z'. Поэтому равенство (15.10a), определяющее $\mathbf{h}$, принимает вид

$$\mathbf{h} = \alpha_1\mathbf{s}_x + \alpha_2\mathbf{s}_y + \alpha_3\mathbf{s}_z, \tag{20.22a}$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — направляющие косинусы оси Z'. Из (20.22а) видно, что оператор Z'-компоненты спина построен из операторов компонент X, Y, Z, определенных в (15.10),

$$\mathbf{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

точно таким же способом, как и оператор Z'-компоненты координаты (оператор умножения на $\alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 z$) образован из операторов координат XYZ. Операторы этого типа называются „векторными операторами".

Соотношение (15.11) показывает, что оператор $(\mathbf{R}\boldsymbol{r}, \mathbf{s}) = (\boldsymbol{r}', \mathbf{s})$ для $\mathbf{R}\boldsymbol{r}$-компоненты спина получается из оператора $(\boldsymbol{r}, \mathbf{s})$ для $\boldsymbol{r}$-компоненты спина путем преобразования с $\mathbf{u}(R)^{-1}$ (т. е. с $\mathbf{O}_R^{-1}$).

В теории спина изложение чаще всего начинают прямо с (20.22а), положив это равенство в основу всей теории.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Линейность и унитарность операторов вращения

Пусть $\bar{\Phi}$ — волновая функция, приписанная вторым наблюдателем тому состоянию, которое первый наблюдатель описывает волновой функцией Φ. Воспользуемся аналогичными обозначениями для всех других состояний. Тогда, согласно (20.8), для всех функций Ψ и Φ имеем

$$|(\Psi, \Phi)| = |(\bar{\Psi}, \bar{\Phi})|. \tag{20.8'}$$

В действительности (20.8′) справедливо только в том случае, если Ψ и Φ соответствуют физическим состояниям и, следовательно, нормированы. В противном случае мы вообще не можем рассматривать „второе описание" состояния Φ, так как только нормированные Φ представляют состояния. Однако полезно определить функции $\bar{\Phi}'$ и для ненормированных Φ'. А именно, положим $\bar{\Phi}' = a\bar{\Phi}$, если $\Phi' = a\Phi$, причем Φ нормирована. Тогда (20.8′) справедливо для всех функций.

Кроме того, (20.8′) не меняется, если умножить Ψ и Φ на постоянные с абсолютной величиной 1. Покажем, что эти постоянные c_Ψ, c_Φ можно выбрать так, чтобы выполнялось не только соотношение

$$|(\mathbf{O}_R\Psi, \mathbf{O}_R\Phi)| = |(\Psi, \Phi)|, \tag{20.8}$$

но и соотношения

$$\begin{gathered} (\mathbf{O}_R\Psi, \mathbf{O}_R\Phi) = (\Psi, \Phi), \\ \mathbf{O}_R(a\Psi + b\Phi) = a\mathbf{O}_R\Psi + b\mathbf{O}_R\Phi, \end{gathered} \tag{20.8a}$$

для всех $c_\Psi\bar{\Psi} = \mathbf{O}_R\Psi$ и $c_\Phi\bar{\Phi} = \mathbf{O}_R\Phi$, где a и b — произвольные постоянные. Трудность в переходе от (20.8) к (20.8а) заключается

в том, что для (20.8) требуется только равенство абсолютных величин скалярных произведений ($O_R\Psi$, $O_R\Phi$) и (Ψ, Φ), тогда как для (20.8а) нужно, чтобы фазы также были равны, причем для всех функций одновременно.

Если функции Ψ_1, Ψ_2, ... образуют полную ортогональную систему, то тем же свойством обладают и $\bar{\Psi}_1$, $\bar{\Psi}_2$, ... Из соотношения $(\Psi_l, \Psi_k) = \delta_{lk}$ и (20.8′) следует, что $(\bar{\Psi}_l, \bar{\Psi}_k) = \delta_{lk}$ и, если не существует функции, ортогональной всем Ψ_l, то не может существовать функции, ортогональной всем $\bar{\Psi}_l$.

Рассмотрим теперь функции $\bar{F}_\varkappa$, которые соответствуют функциям $F_\varkappa = \Psi_1 + \Psi_\varkappa$ при $\varkappa = 1, 2, 3, 4, \ldots$. Если $\bar{F}_\varkappa$ разложить по полной ортогональной системе $\bar{\Psi}_1$, $\bar{\Psi}_2$, ..., то все коэффициенты разложения $(\bar{\Psi}_\varkappa, \bar{F}_\varkappa)$ будут равны нулю, кроме коэффициентов при $\bar{\Psi}_1$ и $\bar{\Psi}_\varkappa$, которые по абсолютной величине равны 1, так как $(\Psi_\lambda, F_\varkappa)$ не обращается в нуль только при $\lambda = 1$ и $\lambda = \varkappa$; для этих же значений λ скалярное произведение равно единице. Таким образом, имеем

$$\bar{F}_\varkappa = y_\varkappa(\bar{\Psi}_1 + x_\varkappa\bar{\Psi}_\varkappa), \quad |y_\varkappa| = |x_\varkappa| = 1 \ (\text{при } \varkappa = 2, 3, \ldots). \tag{20.23}$$

Выберем теперь значение одной из постоянных $c_{\Psi_1} = 1$ и запишем $c_{\Psi_\varkappa} = x_\varkappa$ и $c_{F_\varkappa} = 1/y_\varkappa$. Тогда

$$\begin{gathered} O_R\Psi_1 = \bar{\Psi}_1, \quad O_R\Psi_\varkappa = c_{\Psi_\varkappa}\bar{\Psi}_\varkappa = x_\varkappa\bar{\Psi}_\varkappa, \\ O_R(\Psi_1 + \Psi_\varkappa) = O_RF_\varkappa = c_{F_\varkappa}\bar{F}_\varkappa = \frac{\bar{F}_\varkappa}{y_\varkappa} = O_R\Psi_1 + O_R\Psi_\varkappa. \end{gathered} \tag{20.24}$$

Пусть теперь Φ является произвольной функцией, разложенной по функциям $\Psi_\varkappa$:

$$\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2 + a_3\Psi_3 + \ldots. \tag{20.25}$$

Разложим $\bar{\Phi}$ по полной ортогональной системе функций $O_R\Psi_1$, $O_R\Psi_2$, ...

$$\bar{\Phi} = \bar{a}_1O_R\Psi_1 + \bar{a}_2O_R\Psi_2 + \bar{a}_3O_R\Psi_3 + \ldots.$$

Таким образом,

$$|\bar{a}_\varkappa| = |(O_R\Psi_\varkappa, \bar{\Phi})| = |(x_\varkappa\bar{\Psi}_\varkappa, \bar{\Phi})| = |(\Psi_\varkappa, \Phi)| = |a_\varkappa| \tag{20.26}$$

и, в частности, $|\bar{a}_1| = |a_1|$. Поэтому мы выберем $c_\Phi = a_1/\bar{a}_1$, так что

$$O_R\Phi = c_\Phi\bar{\Phi} = a_1O_R\Psi_1 + a_2'O_R\Psi_2 + a_3'O_R\Psi_3 + \ldots. \tag{20.27}$$

К тому же $|a'_\varkappa| = |a_\varkappa|$. В действительности окажется, что $a'_\varkappa = a_\varkappa$. Чтобы показать это, применим (20.8) к паре функций $F_\varkappa = \Psi_1 + \Psi_\varkappa$ и Φ. Прежде всего мы находим

$$|(F_\varkappa, \Phi)| = |(\Psi_1 + \Psi_\varkappa, \Phi)| = |a_1 + a_\varkappa|.$$

Аналогичным образом, поскольку $\bar{F}_\varkappa$ и $\bar{\Phi}$ отличаются от $\mathsf{O}_R F_\varkappa$ и $\mathsf{O}_R \Phi$ только постоянным множителем с модулем 1,

$$|(\bar{F}_\varkappa, \bar{\Phi})| = |(\mathsf{O}_R F_\varkappa, \mathsf{O}_R \Phi)| =$$
$$= |(\mathsf{O}_R \Psi_1 + \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa, \ a_1 \mathsf{O}_R \Psi_1 + a'_2 \mathsf{O}_R \Psi_2 + \ldots)| = |a_1 + a'_\varkappa|.$$

Следовательно, $|a_1 + a_\varkappa|^2 = |a_1 + a'_\varkappa|^2$ или

$$|a_1|^2 + a_1^* a'_\varkappa + a_1 a'^*_\varkappa + |a'_\varkappa|^2 = |a_1|^2 + a_1^* a_\varkappa + a_1 a_\varkappa^* + |a_\varkappa|^2.$$

Величины $a'^*_\varkappa$ можно исключить из этого соотношения, пользуясь равенством $a'_\varkappa a'^*_\varkappa = a_\varkappa a^*_\varkappa$, в результате чего для $a'_\varkappa$ получаем квадратное уравнение

$$a_1^* a'^2_\varkappa - (a_1^* a_\varkappa + a_1 a_\varkappa^*) a'_\varkappa + a_1 |a_\varkappa|^2 = 0. \tag{20.28}$$

Из (20.28) следует, что либо

$$a'_\varkappa = a_\varkappa, \quad \text{либо} \quad a'_\varkappa = \frac{a_\varkappa^* a_1}{a_1^*}. \tag{20.29}$$

В первом случае для каждой функции $\Phi = \sum_\varkappa a_\varkappa \Psi_\varkappa$ и $\Psi = \sum_\varkappa b_\varkappa \Psi_\varkappa$

$$\mathsf{O}_R \Phi = \sum_\varkappa a_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa, \quad \mathsf{O}_R \Psi = \sum_\varkappa b_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa; \tag{20.30}$$

а также

$$\mathsf{O}_R (a\Phi + b\Psi) = \mathsf{O}_R \sum_\varkappa (aa_\varkappa + bb_\varkappa) \Psi_\varkappa =$$
$$= \sum_\varkappa (aa_\varkappa + bb_\varkappa) \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa = a\mathsf{O}_R \Phi + b\mathsf{O}_R \Psi,$$

так что оператор O_R действительно является *линейным*. Далее

$$(\mathsf{O}_R \Psi, \mathsf{O}_R \Phi) = \left(\sum_\varkappa b_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa, \ \sum_\lambda a_\lambda \mathsf{O}_R \Psi_\lambda\right) = \sum_{\varkappa\lambda} b_\varkappa^* a_\lambda \delta_{\varkappa\lambda} = \sum_\varkappa b_\varkappa^* a_\varkappa$$

и, кроме того,

$$(\Psi, \Phi) = \left(\sum_\varkappa b_\varkappa \Psi_\varkappa, \ \sum_\lambda a_\lambda \Psi_\lambda\right) = \sum_{\varkappa\lambda} b_\varkappa^* a_\lambda \delta_{\varkappa\lambda} = \sum_\varkappa b_\varkappa^* a_\varkappa.$$

Оператор O_R является также *унитарным*, тем самым соотношение (20.8а) доказано.

Необходимо еще показать, что второе возможное значение $a'_\varkappa$ в (20.29) не может осуществляться. С этой целью подставим

$$\mathsf{O}_R\Phi = \mathsf{O}_R \sum_\varkappa a_\varkappa \Psi_\varkappa = \sum_\varkappa a^*_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa \tag{20.31}$$

вместо

$$\mathsf{O}_R\Phi = \mathsf{O}_R \sum_\varkappa a_\varkappa \Psi_\varkappa = \frac{a_1}{a_1^*} \sum_\varkappa a^*_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa,$$

т. е. умножим $\mathsf{O}_R\Phi$ на a_1^*/a_1. Это не может, разумеется, изменить содержания описания.

Рассмотрим теперь две собственные функции оператора Гамильтона, т. е. два стационарных состояния $\chi = \sum_\varkappa u_\varkappa \Psi_\varkappa$ и $\chi' = \sum_\varkappa u'_\varkappa \Psi_\varkappa$ с *различными* энергиями E и E'. Тогда

$$\chi e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + \chi' e^{-i\frac{E'}{\hbar}t} = \sum_\varkappa \left(u_\varkappa e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + u'_\varkappa e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}\right)\Psi_\varkappa \tag{20.32}$$

будет решением зависящего от времени уравнения Шредингера. При втором описании, в силу (20.31), функция

$$\mathsf{O}_R\chi = \sum_\varkappa u^*_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa$$

должна соответствовать состоянию χ, а функция

$$\mathsf{O}_R\chi' = \sum_\varkappa u'^*_\varkappa \mathsf{O}_R \Psi_\varkappa$$

состоянию χ'. В то же время энергии при втором описании попрежнему равны E и E'. Поэтому функция

$$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\mathsf{O}_R\chi + e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}\mathsf{O}_R\chi' = \sum_\varkappa \left(u^*_\varkappa e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + u'^*_\varkappa e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}\right)\mathsf{O}_R\Psi_\varkappa \tag{20.33}$$

также должна быть решением уравнения Шредингера, представляющим состояние, совпадающее с состоянием (20.32) при $t = 0$, и, следовательно, представляющим то же самое состояние в течение всех последующих моментов времени. Но это невозможно, так как, согласно (20.31),

$$\sum_\varkappa \left(u_\varkappa e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + u'_\varkappa e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}\right)^* \mathsf{O}_R\Psi_\varkappa$$

соответствует состоянию (20.32), которое совпадает с (20.33) при $t \neq 0$, *только в случае, если* $E = E'$. Поэтому вторая возможность в (20.29) приводит к противоречию, так что выбор величины c, использованный в (20.24) и (20.27), приводит к первой

возможности в (20.29). Отсюда следует *линейность и унитарность* операторов $\mathbf{O}_R$.

Таким путем мы приходим к важному результату, что два физически эквивалентных описания — после соответствующего изменения свободных констант волновых функций — могут быть преобразованы одно в другое путем *канонического преобразования*. Следует, однако, заметить, что для исключения второй возможности, соответствующей „антиунитарной" функции (20.31), необходимо рассматривать также временну́ю зависимость волновых функций. Точнее, было постулировано, что если состояние Φ по прошествии промежутка времени t превращается в состояние Φ', то состояние $\bar{\Phi}$ в течение того же промежутка времени превращается в состояние $\bar{\Phi}'$. Это предположение является оправданным и действительно необходимым для настоящего обсуждения, но оно окажется непригодным при рассмотрении операции „отражения времени" в гл. 26.