1936 г. Т. XVI, вып. 5

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

Фп 8/101

ПРИНЦИПЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. I

К. В. Никольский, Москва

1. Физика квантовая и физика классическая

Все задачи современной физики можно разделить на две группы: задачи физики классической и задачи физики квантовой. Изучая свойства обычных макроскопических тел, почти не приходится встречаться с квантовыми задачами, потому что квантовые свойства становятся ощутимыми лишь в микромире. Поэтому физика XIX в., исследовавшая лишь макроскопические тела, совершенно не знала квантовых процессов. Это и есть физика „классическая". Для классической физики характерно, что она не учитывает атомистическое строение вещества. Ныне же развитие экспериментальной техники столь широко раздвинуло границы нашего знакомства с природой, что мы теперь знаем, и притом весьма детально, строение отдельных атомов и молекул. Современная физика изучает атомное строение вещества и, потому принципы старой классической физики XIX в. должны были измениться в соответствии с новыми фактами, причем измениться коренным образом. Это изменение принципов и есть переход к физике квантовой.

Напомним, что ныне всякое вещество можно разрушить на отдельные атомы, которые в свою очередь состоят из электронов и ядер, имеющих сложное строение. Ядра состоят из протонов и нейтронов.

Атомизм вещества выражается в следующих фактах. Масса перечисленных так называемых „элементарных" частиц, как показывают экспериментальные измерения, всегда имеет вполне определенное значение. В этом выражается атомизм массы. Напомним далее, что важнейшими из свойств ядер и электронов являются их электрические, точнее, электромагнитные свойства, которые характеризуются их зарядами. Измерения заряда элементарных частиц показывает, что также и заряд имеет атомное строение, т. е. заряд элементарных частиц имеет всегда вполне определенное, одно и то же значение. Атомизм массы и всегда с ней связанного заряда, собственно, и приводит к представлению об элементарных частицах. Однако было бы совершенно неверным отождествить атомизм микромира с существованием частиц, так сказать „пылинок", из которых все состоит. Совершенно верно, что атомизм массы и заряда, с ней связанного, дает основание вводить пред-

области, а именно, поставив задачу статистически. Статистическая постановка задачи не будет устранением неоднозначности, но будет тот метод, который, несмотря на неоднозначность, позволяет совершенно объективно характеризовать квантовые процессы.

Пусть квантовое тело A_1 (будем говорить — квантовая частица) имеет количественные признаки K и R. Пусть признак K может иметь некоторые значения k_1, k_2, $k_3, \cdots k_s, \cdots$, а признак R значения r_1, $r_2 \cdots$, $r_s \cdots$

В результате реакции описанного типа, осуществляемой с целью определения значения K_1, мы получим, допустим, $K = k_1$. Допустим, далее, что повторение этой же реакции в тех же условиях с другим экземпляром этой же квантовой частицы приводит к $K = k_s$. В этом и выразится неоднозначность, о которой говорилось выше. Повторяя эту реакцию много раз на новых экземплярах в тех же условиях, мы получим в результате какое-то распределение исследованных экземпляров по различным значениям признака K. Скажем, N_1 из них имеют $K = k_1$, N_2 $K = k_2$ и т. д.

Полученное таким образом распределение позволяет сделать статистический прогноз для нового еще неисследованного экземпляра, а именно, отношения

$$\frac{N_1}{N}; \quad \frac{N_2}{N}; \quad \cdots \frac{N_r}{N}; \quad \cdots \frac{N_s}{N}; \quad \cdots$$

определят нам вероятности того, что признак K имеет для $(n+1)$-го экземпляра то или иное значение — k_1, $k_2, \cdots k_r, \cdots k_s$ и т. д. Этот статистический прогноз и характеризует совершенно объективно квантовую частицу.

Пользуясь статистическим методом, мы сможем строго формулировать основное различие между классическим и квантовым процессом. Для этого мы формулируем классические задачи статистически и сравним результаты, получающиеся в квантовом случае с результатами, получающимися в случае классическом.

Пусть в классическом случае определение значения некоторого количественного признака K дало нам N экземпляров, для которых установлено, что $K = k_n$. При этом предположим, что N достаточно велико. Рассматривая значение другой какой-либо величины, назовем ее L, мы подвергнем испытанию именно эти N экземпляров, для которых известно, что $K = k_n$. В результате мы сможем отобрать из них некоторое число экземпляров N_s, для которых получилось, что $L = l_s$. В классическом случае мы можем утверждать, что эти N_s экземпляров имеют признаки $K = k_n$ и вместе с тем $L = l_s$. Для квантового же случая это утверждение, вообще говоря, неверно. Экземпляр с $L = l_s$ из числа N_s не обязан иметь $K = k_s$, так как реакция, поведшая к фиксации значения $L = l_s$, меняет ситуацию так, что уже может и не быть оснований утверждать, что сохранилось значение $K = k_n$. В этом и заключается основное различие между квантовыми и классическими процессами.

Роль кванта действия была особенно подчеркнута Н. Бором. Мы придадим теперь только что отмеченным количественным следствиям конечности взаимодействий, выражаемой квантом действия, строгую количественную математическую формулировку.

Сначала мы разовьем независимо от физики наиболее рациональный для этих целей статистический метод, а затем, посредством его, формулируем количественно квантовые законы.

3. Статистический метод квантовой теории

Напомним основные статистические понятия, с которыми мы будем оперировать. Это будут:

1. Среднее статистическое значение какой-либо величины;

2. Средняя квадратичная ошибка, служащая мерой отклонения среднего значения от возможного истинного, или, как говорят, „мерой рассеяния" данной величины для данной статистической совокупности.

Пусть имеются независимые одинаковые экземпляры одного и того же объекта, подвергаемого статистическому изучению и характеризуемого количественными признаками K, L, R, S. Один из этих признаков должен быть вполне определен как признак, по которому объединены экземпляры объектов в статистическую совокупность, испытания которой производятся. Скажем, что

$$L = l^*.$$

Соответственно мы должны все величины, относящиеся к исследуемой совокупности, отмечать индексом l^*. Производя статистическое испытание нашей совокупности, мы исследуем распределение экземпляров по значениям различных величин K, $L \cdots$ Другими словами, мы определим вероятности

$$w(k_1, l^*),\ w(k_2, l^*), \ldots w(k_s, l^*) \ldots$$

того, что $N+1$-ый объект имеет то или иное (из возможных) значение величины K. Далее, вероятности

$$w(r_1, l^*),\ w(r_2, l^*), \ldots w(r_s, l^*) \ldots$$

того, что некоторый еще не испытанный объект совокупности имеет то или иное значение величины R.

Предположим для простоты, что величины K и R имеют бесконечную прерывную совокупность значений

$$k_1,\ k_2, \ldots k_s, \ldots$$

$$r_1,\ r_2, \ldots r_s, \ldots$$

(Все наши результаты непосредственно обобщаются и на случай, когда значения величины непрерывны. В этом случае мы должны

Эта формула определяет аппроксимацию функции $f(x)$ линейными выражениями

$$\sum_{n=1}^{N} c(n)\varphi(n, x)$$

при возрастающем N. Аппроксимация эта имеет минимальную квадратичную ошибку, что и выражает вышенаписанная формула. Ее часто пишут в виде разложения

$$f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} c(n)\varphi(n, x).$$

Коэфициенты $c(n)$, определяющие представление функции $f(x)$, посредством данной системы функций $\varphi(n, x)$ могут быть выражены через $f(x)$ и $\varphi(n, x)$, а именно: они равны

$$c(n) = \int \overline{\varphi(n, x)} f(x)\, dx.$$

Формулу разложения, т. е. определение замкнутости, можно написать в виде

$$\int |f(x)|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c(n)|^2 \text{: (равенство Бесселя)}$$

Условие, что все $c(n) = 0$, равносильно условию $f(x) = 0$. Этими общеизвестными соотношениями мы сейчас и воспользуемся. Мы видим, прежде всего, что, взяв какую-либо замкнутую систему функций, мы могли бы разложить по ней все наши функции $w(k, l)$, $w(r, l)$, так как они содержат общую независимую переменную l, имеющую для данной совокупности заданное значение $l = l^*$. Соотношения между коэфициентами этих разложений и могли бы служить для установления связей, нас интересующих. Однако этот путь не целесообразен потому, что функции $w(k, l)$, $w(r, l)$, не совсем произвольны. Они ведь имеют смысл вероятностей и это должно быть явно формулировано, в виде условий которым должны подчиняться эти функции. Далее, мы должны иметь дело с функциями, имеющими интегрируемый квадрат модуля.

Условия эти в явном виде гласят:

$$w(k, l) \geqslant 0,$$

т. е. вероятность — вещественное, положительное число

$$w(k_n, k_m) = 0 \text{ при } n \neq m$$

и

$$w(k_n, k_n) = 1.$$

(Несовместность и достоверность событий $k = k_n$ и $k = k_m$)
Далее,

$$\int \rho(k, l)\, dk = 1, \qquad (N)$$

если k непрерывно и

$$\sum_n w(k_n, l) = 1, \qquad (N)$$

если k дискретно.

Мы видим, что эти условия автоматически удовлетворятся, если мы перейдем от $w(k, l)$ к вспомогательным функциям — назовем их статистическими, — определяемым уравнениями

$$\rho(k, l^*) = |c(k, l^*)|^2; \ \rho(r, l^*) = |d(r, l^*)|^2 \text{ и т. д.}$$

для k, r непрерывных и

$$w(k_n, l^*) = |c(k_n, l^*)|^2 \text{ и } w(s_n, l^*) = |d(s_n, l^*)|^2$$

для k и s прерывных.

Иначе говоря, мы выражаем вероятности как квадраты модулей некоторых вспомогательных чисел (функций), остающихся произвольными. Условия (N) примут вид

$$\int |c(k, l)|^2 dk = 1$$

или

$$\sum_n |c(k_n, l)|^2 = 1,$$

т. е. мы видим, что наши функции $c(k, l)$ как раз являются функциями требуемого класса.

Поэтому-то и целесообразно проводить исследование не с самими вероятностями, а со статистическими функциями, имеющими интегрируемый квадрат модуля.

Возьмем теперь какую-либо замкнутую систему функций переменного в

$$\varphi(n_1, l), \varphi(n_2, l), \ldots, \varphi(n_k, l), \ldots$$

и разложим по ней все наши статистические функции.

Если индекс n_k прерывен, то наши разложения имеют вид

$$c(k_s, l^*) = \sum_{\mu} c_{n_\mu}(k_s) \varphi_{n_\mu}(l^*) \qquad \text{и т. д.,}$$

где

$$\varphi_{n_\mu}(l^*) = \varphi(n_\mu, l^*), \quad c_{n_\mu}(k_s) = c(n_\mu, k_s).$$

Если же n непрерывно, то разложения имеют вид

$$c(k_s, l^*) = \int c(k_s, n) \varphi(n, l)\, dn \qquad \text{и т. д.,}$$

Подставим теперь эти выражения в средние. Тогда мы выразим их через новую независимую переменную n. Для простоты предположим, что n непрерывно, а величины K, R и т. д. имеют дискретную бесконечную совокупность значений. После подстановки мы получим, например, для среднего значения величины K:

$$\text{ср. зн. } K = \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu |c(k_\mu, l^*)|^2 =$$

$$= \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu \int c(k_\mu, n) \varphi(n, l^*)\, dn \int \overline{c(k_\mu, n)}\, \varphi(n, l^*)\, dn =$$

$$= \int dn\, \overline{\varphi(n, l^*)} \int dn' \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu c(k_\mu, n) \overline{c(k_\mu, n')}\, \varphi(n', l)\, dn'.$$

Положим

$$K(n, n') = \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu c(k_\mu, n) \overline{c(k_\mu, n')}.$$

Тогда мы можем записать среднее значение K в виде

$$\text{ср. зн. } K = \int dn\, \varphi(n, l^*) \int K(n, n') \varphi(n', l^*)\, dn'.$$

Мы замечаем, что выражение

$$\int K(n, n')\varphi(n', l^*)\,dn' \equiv K\varphi(n, l^*)$$

есть линейный интегральный оператор, имеющий ядро $k(n, n')$ и примененный к функции $\varphi(n', l^*)$. Таким образом мы запишем наше среднее в виде

$$\text{ср. зн. } K = \int \bar{\varphi}(n, l^*)\,K\varphi(n, l^*)\,dn',$$

где K — символ линейного оператора, введенный нами выше.

Выражения полученного типа называются эрмитовыми формами и обозначаются следующим образом

$$\int \bar{\varphi}(n, l^*)\,K\varphi(n, l^*)\,dn = (K\varphi, \varphi).$$

Итак,

$$\text{ср. зн. } K = (K\varphi, \varphi).$$

Проделав такое же преобразование, мы получим

$$\text{ср. зн. } R = (R\varphi, \varphi),$$

т. е.

$$\text{ср. зн. } R = \int \bar{\varphi}(n, l^*)\,R\varphi(n, l^*)\,dn,$$

где $\varphi(n, l^*)$ — та же самая функция, что и в среднем для k, а R — линейный интегральный оператор, примененный к $\varphi(n, l^*)$

$$R\varphi(n, l^*) = \int R(n, n')\,\varphi(n', l^*)\,dn',$$

имеющий ядром

$$R(n, n') = \sum_{\mu=1}^{\infty} l_\mu d(l_\mu, n)\,\overline{d(l_\mu, n')},$$

причем $d(l_\mu, n)$ — коэфициенты в разложении статистической функции, определяющей вероятность $w(r, l^*)$, по выбранной нами замкнутой системе функций.

Таким же образом мы вычислим и все другие средние и во всех случаях мы получим их в виде эрмитовых форм, построен-

ных из одной и той же функции φ (n, l^*) и различных операторов:

$$\text{ср. зн. } K = (K\varphi, \varphi),$$
$$\text{ср. зн. } R = (R\varphi, \varphi),$$
$$\text{ср. зн. } T = (T\varphi, \varphi)$$

и т. д.

Мы получили линейные интегральные операторы K, R, T, входящие в эрмитовы формы, по той причине, что считали, что наши величины K, R, T имеют дискретную бесконечную совокупность возможных значений. Если же речь идет о величинах, имеющих непрерывную, или же смешанную совокупность возможных значений, то нетрудно обобщить полученные результаты. Для этого надо лишь воспользоваться понятием интеграла Стильтеса. В результате мы получим линейные эрмитовы (т. е. имеющие вещественные характеристические числа) операторы. Для линейного эрмитового оператора — K справедливо условие

$$(K\varphi, \varphi) = (\varphi, K\varphi).$$

Обобщение это не принципиального, а чисто математического характера, и мы не останавливаемся на нем.

До сих пор как операторы K, R, S, так и статистическая функция φ (n, l^*), служащая для конструкции средних, остаются совершенно неопределенными. Это лишь способ выражения. Однако мы сможем установить связь между операторами и функцией φ (n, l^*), рассмотрев средние квадратичные ошибки. Мы отмечали выше, что если величина имеет определенное, истинное значение для рассматриваемой статистической совокупности, то для этой величины квадрат среднего равен среднему квадрату. Выразим это условие, пользуясь установленной нами формой для средних. Пусть некоторая величина K имеет для нашей статистической совокупности заданное значение K_n. Это значит, что должно быть

$$(\text{ср. зн. } K)^2 = \text{ср. зн.}(K^2)$$

Но

$$(\text{ср. зн. } K)^2 = (K\varphi, \varphi),$$

где φ — функция, характеризующая рассматриваемую статистическую совокупность.

Мы легко можем найти среднее K^2

$$\text{ср. зн. } (K^2) = \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu^2 \, w(k_\mu, l^*),$$

а именно: мы получим

$$\text{ср. зн. } (K^2) = (K^2 \varphi, \varphi),$$

где K^2 — линейный интегральный оператор, имеющий ядро

$$K(n, n') = \sum_{\mu=1}^{\infty} k_\mu^2 c(k_\mu, n)\, c(k_\mu, n'),$$

т. е. представляющий собою дважды повторенную операцию K. Зная выражения для ср. зн. K^2 (ср. зн. k^2), мы запишем условие

$$\Delta K = 0$$

в форме

$$\text{ср. зн. } (K - \text{ср. зн. } K)^2 = 0,$$

т. е.

$$[\varphi, \{K - (K\varphi, \varphi)\}^2 \varphi] = 0.$$

Полагая $[K - (K\varphi, \varphi)] = f$ и пользуясь эрмитовостью оператора $[K - (K\varphi, \varphi)]$, мы получим

$$(f, f) = 0,$$

т. е.

$$f = 0$$

или

$$[K - (K\varphi, \varphi)]\, \varphi = 0$$

или, выписав явно

$$\int K(n, n')\, \varphi(n', l^*)\, dn' = (K\varphi, \varphi)\, \varphi(n', l^*).$$

Мы получаем, следовательно, интегральное уравнение для функции $\varphi(n, l^*)$, характеризующей нашу статистическую совокупность. Но в нашем случае среднее совпадает со значением k_n; поэтому мы можем переписать последнее уравнение следующим образом:

$$\int K(n, n')\, \varphi(n'; l^*, k_\mu)\, dn' = k_\mu \varphi(n, l^*, k_\mu),$$

где мы наряду с l^* пишем также и K_μ, так как величина, имеющая заданное значение, может быть выбрана в качестве той, которая характеризует экземпляры совокупности (т. е. играет роль величины l^*).

Если бы мы знали ядро этого интегрального уравнения, то могли бы вычислить $\varphi(n, l^*, k_\mu)$, а также и k_μ. В самом деле, $\varphi(n, l^*, k_\mu)$ — фундаментальные функции этого интегрального уравнения, а k_μ — его характеристические числа.

Таким образом наш метод получает законченный характер.

причем, функция $(\varphi r_\mu, n)$ та же, что и в предыдущем уравнении. Это значит, что уравнения имеют общие, отличные от нуля, решения. Отсюда следует, что операторы K и R коммутируют друг с другом, т. е.

$$KR(f) = RK(f)$$

для любых f. В самом деле,

$$KR\varphi = K(r_\mu \varphi) = r_\mu (K\varphi) = RK\varphi.$$

Условие коммутативности двух операторов R и K часто пишут в символической форме

$$KR - RK = 0.$$

Итак, мы получаем классический случай, если операторы, входящие в билинейные формы, коммутируют между собою. Обратно, неустранимое рассеяние, характерное для квантовых процессов, выражается, как видим, некоммутативностью операторов тех величин, для которых имеется неустранимое рассеяние. В самом деле, если

$$KR - RK \neq 0,$$

то вышеприведенные уравнения, выражающие условия $\Delta K = 0$ и $\Delta R = 0$, несовместны и потому нет такой статистической совокупности, для которой выполнялись бы совместно оба эти условия.

Мы видим, далее, что при некоммутативности операторов K и R квантовых величин неравенство Шварца может служить для численной оценки корреляции, существующей между ΔK и ΔR, так как это неравенство гласит

$$(\Delta K)_{l^*} \cdot (\Delta R)_{l^*} \geqslant \frac{1}{2} \text{ const.}$$

Постоянная, стоящая справа, и послужит для меры корреляции. Она зависит от статистической функции, характеризующей статистическую совокупность, а также от операторов K и L. Поэтому, она вообще различна для различных статистических совокупностей и для различных величин. Однако мы можем предположить — это и будет основным предположением квантовой механики, — что существуют такие величины, статистическая квантовая корреляция которых не зависит от выбора статистической совокупности, т. е. постоянная, стоящая в правой части только что написанного неравенства, не зависит от $\psi(x, l^*)$, характеризующей статистическую совокупность. Это условие выполнится лишь в том случае, если выражение

$$\int \bar{\psi}(x, l^*)\,[KR - RK]\,\psi(x, l^*)\,dx$$

не будет меняться при замене $\psi(x, l^*)$ на другие статистические функции. Это же возможно лишь в том случае, если оператор $(KR - RK)$ равен постоянной, которую можно вынести за знак интеграла. Тогда

$$\int \bar{\psi}(x, l^*)\,[KR - RK]\,\psi(x, l^*)\,dx = \text{const}\cdot\int |\psi|^2\,dx = \text{const}.$$

Итак, вышепоставленное „условие инвариантности" приводит к тому, что операторы величин с инвариантной корреляцией должны быть связаны соотношением

$$i(KR - RK) = \qquad i = \sqrt{-1},$$

где $\hbar$ — некоторое вещественное число. Этот параметр статистической корреляции и называется квантом действия. Чтобы отличить величины, связанные попарно, инвариантной корреляцией, мы введем для них и их операторов специальное обозначение и наименование. Мы назовем их каноническими, сопряженными импульсами P_μ и координатами Q_μ и запишем предыдущее уравнение в форме

$$i = (P_\mu Q_\mu - Q_\mu P_\mu) = \hbar;$$

$\mu = 1, 2, \ldots f$, где f — число пар сопряженных переменных, возможное для рассматриваемой какой-либо системы (число степеней свободы). Соотношение это должно быть дополнено условием

$$P_\mu Q_\nu - Q_\nu P_\mu = 0, \qquad \nu \neq \mu$$

(независимость степеней свободы). Для погрешностей ΔP_μ и ΔQ_μ получим

$$\Delta P_\mu \cdot \Delta Q_\mu \geqslant \frac{\hbar}{2},$$

причем мы имеем право отбросить индекс l^*, так как это соотношение по определению величин P_μ и Q_μ не зависит от выбора статистической совокупности. Название — импульсы и координаты не случайно, так как можно показать, что при переходе к классическому предельному случаю мы действительно получим из них классические обобщенные импульсы и координаты.

Только что написанное соотношение (так называемое неравенство Гейзенберга) устанавливает в количественной форме статистическую корреляцию рассеяния импульса и координаты. Мы видим чрезвычайное своеобразное ограничение классических представлений в квантовой области. Чем меньше ΔQ, тем больше ΔP и обратно. Однако из этого же соотношения видно, что погрешность ΔQ можно

сделать произвольно малой, т. е. обобщенную координату можно определить и при том сколь угодно точно. Но при этом возрастает неопределенность импульса. Обратно, мы можем всегда сделать ΔP очень малой за счет возрастания ΔQ.

P_μ и Q_μ — обобщенные координаты и импульсы. Специализируя их так, чтобы они имели характер обычных импульса и координаты, мы можем рассматривать введение их как использование понятия частицы в квантовой области. В самом деле, возможность точно определить координат Q_μ и при том во всех условиях и есть выражение возможности локализации частицы в определенном месте.

С другой стороны, возможность точно определить импульс P_μ выражает применимость энергетических представлений также и в квантовой области, т. е. возможность формулировки законов сохранения импульса и энергии для процессов, в которых участвуют и квантовые тела. Однако, как видим, это понятие „квантовой частицы" коренным образом отличается от старого понятия частицы, так как последнее основано на совместном использовании как понятия импульса и энергии, так и понятия координаты. Заметим, что лишь все эти понятия, вместе взятые, приводят к представлению о механическом движении, которое в квантовой механике возможно лишь как статистически переработанное понятие. Если пренебречь ролью кванта действия, то нет препятствий к полному проведению классического описания.

Рассмотрим теперь подробнее основные свойства квантовых частиц. Естественнее всего воспользоваться для описания поведения квантовых частиц обобщенными импульсами и координатами P_μ и Q_μ, точнее их средними, определенными для различных моментов времени. Разумеется, должны быть использованы также различные функции от P_μ Q_μ.

Законы, описывающие поведение квантовых частиц, определяются тем, что условие статистической корреляции между P_μ и Q_μ выраженное уравнением

$$i(P_\mu Q_\mu - Q_\mu P_\mu) = \hbar,$$

инвариантно, т. е. не меняется при изменении состояния квантовой системы. Таким образом мы можем выразить изменение состояния какой-либо квантовой системы как изменение статистической функции φ, или операторов P_μ, Q_μ, происходящее при соблюдении условия неизменности среднего

$$[i(PQ - QP)\varphi, \varphi] = \hbar$$

(инвариантность действия). Изменение состояния системы квантовых частиц выразится изменением средних различных величин K, L

$$(K\varphi, \varphi), (L\varphi, \varphi), \ldots$$

Свойства же квантовой системы выражаются соотношениями, существующими между средними.

Найдем общие свойства квантовых систем. Изменение состояния можно описать изменением статистической функции φ, переходящей в новую φ^*. При этом, какое-либо среднее $(K\varphi,\varphi)$ изменится в $(K\varphi^*,\varphi^*)$. Если оно инвариантно по отношению к этому преобразованию, как например, действие, то

$$(K\varphi, \varphi) = (K\varphi^*, \varphi^*).$$

Мы можем выразить φ^* как некоторую функцию от φ, воспользовавшись представлением об операторе:

$$\varphi^* = U(\varphi)$$

В этой формуле U — некоторый, пока неизвестный оператор, преобразующий старую функцию φ в новую φ^*.

Наряду с только что написанным преобразованием должно существовать и обратное, т. е. переводящее φ^* в φ. Мы запишем это обратное преобразование, опять воспользовавшись символом оператора, написав обратный оператор символом U^{-1} так, что

$$\varphi = U^{-1}(\varphi^*).$$

Эта символика выбрана так, что

$$UU^{-1} = U^{-1}U = 1, \text{ т. е. } \varphi = \varphi \text{ или } \varphi^* = \varphi^*.$$

как и должно быть.

Напишем теперь условие инвариантности некоторого среднего, воспользовавшись оператором U

$$(K\varphi, \varphi) = (KU\varphi, U\varphi)$$

Но это выражение инвариантно и по отношению к обратному преобразованию U^{-1}. Поэтому

$$(K\varphi, \varphi) = (KU\varphi, U\varphi) = (U^{-1}KU\varphi, \varphi) = (K^*\varphi, \varphi),$$

где

$$K^* = U^{-1}KU.$$

Мы видим, что инвариантные средние можно преобразовывать, либо изменяя статистическую функцию посредством оператора U, либо же переходя к новому оператору K^*, построенному из U и K по только что написанной формуле. Тогда статистическая функция остается неизмененной. Если K — эрмитов оператор, т. е. такой, что

$$(K\varphi, \varphi) = (\varphi, K\varphi),$$

то оператор U, оставляющий это среднее инвариантным, называется унитарным. Он имеет следующее свойство. Мы можем для линейного оператора A подобрать такой новой оператор* — назовем его A^+ — что

$$(A\varphi, \varphi) = (\varphi, A^+\varphi).$$

Если

$$A^+ = A,$$

то наш линейный оператор A и будет эрмитовым. Унитарным же оператором будет тот, для которого

$$U^{-1} = U^+ \quad \text{и} \quad \text{потому} \quad U^+U = UU^+ = 1.$$

Предыдущие формулы перепишутся следующим образом:

$$K^* = U^+KU$$

и

$$\varphi^* = U(\varphi), \ \varphi = U^+(\varphi).$$

Вспоминая, что законы поведения квантовых систем определяются инвариантностью действия, мы видим, что эти законы выражаются тем, что операторы P_μ и Q_μ преобразуются в

$$P^*_\mu = U^+P_\mu U, \ Q^*_\mu = U^+Q_\mu U, \ U^+U = UU^+ = 1, \tag{I}$$

где U — один и тот же линейный унитарный оператор. Если P_μ и Q_μ характеризуют систему в некоторый момент времени t_0, а P^*_μ и $Q_\mu{}^*$ — в момент t, то эти формулы и есть обобщение ньютоновских законов движения. В самом деле, можно обратно показать, что из этих квантовых законов получаются классические, если перейти к классическому предельному случаю, когда $\hbar \to 0$.

Предыдущие формулы для операторов следует понимать как формальную запись соотношений, имеющих место для средних, т. е. если

$$\text{ср. зн. } P_\mu = (P_\mu\varphi, \varphi) \text{ и ср. зн. } Q_\mu = (Q_\mu\varphi, \varphi),$$

то

$$\text{ср. зн. } P^*_\mu = (U^+P_\mu U\varphi, \varphi) \text{ и ср. зн. } Q^+_\mu = (U^+P_\mu U\varphi, \varphi)$$

* Он называется „сопряженным“ „адъюнгированным“.

[Аналогично, ср. зн. $(U^+U) =$ ср. зн. $(UU^+) = 1$].

Эти формулы мы должны несколько уточнить, а именно указать явно, при какой заданной величине составлена рассматриваемая статистическая совокупность. Мы должны написать:

$$(\text{ср. зн. } P_\mu)_{\alpha=\alpha'} = (P_\mu \varphi_{\alpha'}, \varphi_{\alpha'}); \ (\text{ср. зн. } Q_\mu)_{\alpha=\alpha'} = (Q_\mu \varphi_{\alpha'}, \varphi_{\alpha'}),$$

$$(\text{ср. зн. } Q^*_\mu)_{\beta=\beta'} = ([U^+ P_\mu U]\, \varphi_{\beta'}, \varphi_{\beta'}); \ (\text{ср. зн. } Q^*)_{\beta=\beta'} = \\ = (U^+ Q U \varphi_{\beta'}, \varphi_{\beta'}),$$

где α и β — некоторые величины, имеющие для всех экземпляров статистической совокупности заданные значения α' и β'. В первом случае совокупность характеризуется тем, что $\alpha = \alpha'$, а во втором случае — тем, что $\beta = \beta'$. Так как мы пока имеем дело лишь с четырьмя величинами — старыми и новыми обобщенными координатами и импульсами, то за α' и β' мы можем выбрать либо значения импульсов (старых — p', новых — $p^{*\prime}$), либо значения координат (старых — q', новых $q^{*\prime}$). Соответственно мы получаем четыре типа преобразований, осуществляемых посредством оператора U четырех разновидностей:

$$U(\alpha', \beta') = U(p', p^{*\prime}),\ U(q', q^{*\prime}),\ U(p', q^{*\prime}),\ U(q', p^{*\prime}).$$

Соответственно сказанному, мы, например, напишем

$$\text{ср. зн. } (P_\mu)_{Q_\mu = q'} = (P_\mu \varphi_{q'}, \varphi_{q'})$$

и т. д.

Если бы нам был известен явный вид операторов P_μ и Q_μ, то все только что отмеченные соотношения получили бы определенный количественный характер и выражали бы совершенно определенные количественные физические законы. Однако, это так и есть, потому что соотношение между P_μ и Q_μ, определяющее инвариантную статистическую корреляцию, определяет вид операторов P_μ и Q_μ, с точностью до унитарного преобразования. Чтобы убедиться в этом мы напишем уравнение

$$i(P_\mu Q_\mu - Q_\mu P_\mu)\, \varphi(\alpha, \beta) = \hbar \varphi(\alpha, \beta),$$

взяв за β значение координаты Q_μ, т. е. положив

$$Q_\mu = q', \beta = q',$$

так что уравнение получит вид

$$i(P_\mu q' - q' P_\mu)\varphi(\alpha, q') = \hbar\varphi(\alpha, q').$$

Задача заключается в том, чтобы определить вид оператора P_μ так, чтобы это равенство выполнилось тождественно.

Вспомнив формулу диференцирования по частям

$$d(f\cdot\varphi) = df\cdot\varphi + f\cdot d\varphi,$$

мы видим, переписав ее следующим образом

$$d(f\cdot\varphi) - f\cdot d\varphi = df\cdot\varphi$$

и сравнив с нашим уравнением, что, если $f = q'$ и $\varphi = \varphi(\alpha, q')$ то,

$$P_\mu = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial Q_\mu} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}.$$

В самом деле, тогда мы получаем

$$i\frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial q'}(q'\varphi) - q'\frac{\partial\varphi}{\partial q'}\right] = \hbar\varphi,$$

что и требовалось доказать. Зная явный вид операторов P_μ и Q_μ мы получаем возможность выписать и в все средние в явном виде. Например,

$$(\text{ср. зн. } P)_{\alpha'} = \int \bar{\varphi}(\alpha', q')\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\varphi(\alpha', q')\,dq',$$

где не явно выписана зависимость μ от других координат, по которым также нужно провести интеграцию.

Зная явный вид операторов P_μ и Q_μ и умея вычислять их средние значения для различных статистических совокупностей, мы сможем вычислить значения средних различных функций от P_μ и Q_μ, которыми и сможем воспользоваться для характеристики квантовых систем.

Воспользуемся явным видом операторов P_μ и Q_μ для того, чтобы написать явно основные квантовые законы — (I). Заметим, что мы можем, умножив их на U слева, придать им следующий вид:

$$UP_\mu^* = P_\mu U,\ UQ_\mu^* = Q_\mu U;\ \mu = 1, 2, \ldots f.$$

Замечая, что U — оператор, переводящий φ'_α, φ'_β, скажем

$$\varphi_{\beta'} = \int U(\beta', \alpha')\varphi_{\alpha'} d\alpha',$$

мы сможем переписать эти „операторные уравнения" в следующем виде:

$$(UP^*_\mu \varphi_{\beta'}, \varphi_{\alpha''}) = (P_\mu U\varphi_{\beta'}, \varphi_{\alpha''}),$$

и

$$(UQ^*_\mu \varphi_{\beta'}, \varphi_{\alpha''}) = (Q_\mu U\varphi_{\beta'}, \varphi_{\alpha''}).$$

Раньше мы отмечали, что за α' и β' мы можем взять либо $p^{*\prime}$, p', $q^{*\prime}$, q', получив соответственно четыре типа преобразований. Воспользовавшись же тем, что мы знаем явный вид операторов P_μ, P_μ,* мы легко найдем следующие типы преобразований (индексы μ мы везде опускаем):

1) $$(UP^*\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^{*\prime\prime}}(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}})$$

$$(PU\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}); U = U(q', q^{*\prime\prime}).$$

2) $$U = U(p', q^{*\prime}).$$

$$(UP^*\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^{*\prime\prime}}(U\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}})$$

Замечая, что

$$Q^* = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p^{*\prime}}$$

и

$$Q = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'},$$

$$(QU\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'}(U\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}),$$

3) $$U = U(p^{*\prime}, q').$$

Этот тип получается из предыдущего переменой знака и заменой величин отмеченных звездочкой на неотмеченные и обратно.

4) $$U = U(p^{*\prime}, p'')$$

получается из первого переменой знака и заменой p на q. Предположим теперь, что мы рассматриваем предельный случай, когда

ролью кванта действия можно пренебречь, т. е. когда возможно заменить средние статистические значения всех величин истинными их значениями. Тогда мы можем заменить

$$(UP^*\varphi_{q'}, \varphi_{q''})$$

на

$$p^{*\prime}\cdot(U\varphi_{q'}, \varphi_{q''}),$$

$$(PU\varphi_{q'}, \varphi_{q''})$$

на

$$p'\cdot(U\varphi_{q'}, \varphi_{q''})$$

и

$$(Q^*U\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}})$$

на

$$q^{*\prime}\cdot(U\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}})$$

и т. д.

Соответственно этому, мы получим в первом случае:

$$p^{*\prime}\cdot(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^{*\prime\prime}}(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}),$$

$$p'(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}),$$

эти уравнения имеют решения

$$(U\varphi_{q'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = e^{+\frac{i}{\hbar}S(q', q^{*\prime\prime})}$$

и

$$p^{*\prime} = -\frac{\partial S}{\partial q^{*\prime\prime}}, \quad p' = \frac{\partial S}{\partial q'},$$

а это есть не что иное как классические формулы канонических, касательных преобразований импульсов и координат (p', q') в импульсы и координаты $(p^{*\prime}, q^{*\prime})$, совершаемых посредством функции действия $S(q', q^{*\prime\prime})$.

Аналогично, для второго типа преобразований мы найдем при переходе к классическому предельному случаю

$$(U\varphi_{p'}, \varphi_{q^{*\prime\prime}}) = e^{+\frac{i}{\hbar}S(p', q^{*\prime\prime})}$$

и

$$p^{*\prime} = \frac{\partial S}{\partial q^{*\prime\prime}}, \quad -q' = \frac{\partial S}{\partial p'},$$

т. е. вновь классические формулы канонических преобразований. Эти формулы определяют конечные касательные преобразования.

Как известно, бесконечно малые касательные преобразования, т. е. изменение импульсов P_μ и координат Q_μ за время dt, определяются в классической механике уравнениями Гамильтона

$$dP_\mu = -\frac{\partial H}{\partial q_\mu}\,dt, \quad dq_\mu = \frac{\partial H}{\partial p_\mu}\,dt,$$

где

$$H = H(p_1 \ldots p_f; q_1 \ldots q_f)$$

функция Гамильтона, характеризующая рассматриваемую классическую систему. Эти уравнения также могут быть получены из квантовой теории в предельном классическом случае. Для того, чтобы видеть это, мы должны рассмотреть бесконечно малые канонические преобразования квантовых переменных.

Полагая в преобразовании оператора A

$$A^* = UAU^+,$$

оператор U бесконечно мало отличным от единицы, т. е.

$$U = 1 + iD \cdot \delta\tau,$$

где D — эрмитов оператор.

Тогда

$$U^+ = 1 - iD\delta\tau.$$

Подставляя эти выражения для U и U^+, найдем

$$A^* = A + i(DA - AD)\,\delta\tau.$$

и так как

$$\frac{dA}{dt} = \frac{A^* - A}{\delta t},$$

то

$$\frac{dA}{dt} = i\,(DA - DD).$$

Эта символическая формула означает, что для среднего $(A\varphi, \varphi)$ справедливо соотношение

$$\frac{d}{dt}(A\varphi, \varphi) = [i\,(DA - AD)\varphi, \varphi].$$

Таким образом

$$\frac{d}{dt}(P_\mu\varphi, \varphi) = [i\,(DP_\mu - P_\mu D)\,\varphi, \varphi]$$

и

$$\frac{d}{dt}(Q_\mu\varphi, \varphi) = [i(DQ_\mu - Q_\mu D)\varphi, \varphi].$$

Далее, так как D — эрмитов оператор, то

$$\delta(A\varphi, \varphi) = i\,\delta t\,[(DA\varphi, \varphi) - (AD\varphi, \varphi)] = i\,\delta t\,[(A\varphi, D\varphi) - (AD\varphi, \varphi)].$$

С другой стороны, мы можем выразить изменение среднего посредством изменения статистической функции φ, а именно:

$$\delta A(t_0) = [(A\,\delta\varphi, \varphi) + (A\varphi, \delta\varphi)].$$

Сравнивая эту формулу с предыдущей, мы найдем, что должно быть

$$-\delta\varphi = iD(\varphi)\,\delta t$$

или

$$-\frac{1}{i}\frac{d\varphi}{dt} = D(\varphi),$$

где D — линейный оператор, определяющий бесконечно малое касательное преобразование квантовых канонических переменных P_μ и Q_μ. Если умножить последнее уравнение на $\hbar$ и назвать

$$H = \hbar D,$$

то мы получаем уравнение, известное под названием уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi}{dt} = H(\varphi).$$

При переходе к классическому предельному случаю, оно переходит в уравнение Якоби. Это уравнение Шредингера позволяет вычислить статистическую функцию φ, характеризующую квантовую систему.

Возвращаясь к уравнениям Гамильтона, мы отметим, что, пользуясь уравнением Шредингера и связью между операторами P_μ и Q_μ, можно показать, что в квантовой области справедливы соотношения

$$\frac{d}{dt}(P_\mu\varphi, \varphi) = -\left(\frac{\partial H}{\partial q_\mu}\varphi, \varphi\right)$$

и

$$\frac{d}{dt}(Q_\mu\varphi, \varphi) = \left(\frac{\partial H}{\partial p_\mu}\varphi, \varphi\right); \quad (\mu = 1, 2 \ldots f),$$

т. е.

$$\frac{d}{dt}(\text{ср. зн. } P_\mu) = -\text{ср. зн.}\left(\frac{\partial H}{\partial q_\mu}\right)$$

и

$$\frac{d}{dt}(\text{ср. зн. } Q_\mu) = \text{ср. зн.}\left(\frac{\partial H}{\partial p_\mu}\right).$$

Следовательно, если пренебречь квантом действия, т. е. заменить средние — значениями, мы получим из этих уравнений класические уравнения Гамильтона, и ср. зн. ($\hbar D$) перейдет в классическую Гамильтонову функцию.

Этот результат однозначно показывает, что, игнорируя рассеяние, обусловленное квантом действия, получаем классические механические соотношения, т. е. квантовая механика является последовательно проведенным учетом роли кванта действия в механических процессах. Вместе с тем мы видим, что величины P_μ и Q_μ, определенные нами в квантовой области, независимо от каких-либо соображений по аналогии с классической теорией, действительно являются обобщенными импульсами и обобщенными координатами.

До развития квантовой механики уже была ясна центральная роль понятия действия, а именно: исследования, проведенные в конце XIX в., показали, что законы механики, могут быть формулированы как законы изменения обобщенных импульсов и координат, оставляющие инвариальным действие. Мы видим теперь основание для этой ситуации.

Пользуясь изложенным методом, мы могли бы, шаг за шагом, развить все механические квантовые законы, а затем уже, пренебрегая квантом действия, установить и классические соотношения. При этом фундаментальное отличие квантовых законов от классических заключается в том, что они выполняются лишь при вполне определенных численных значениях различных механических величин. Это обстоятельство чрезвычайно существенно, и, как показывает эксперимент, является несомненным успехом квантовой теории.

В заключение скажем несколько слов о границах квантовой механики. Мы видели вначале, что квантовая механика основана на чрезвычайно своеобразной постановке всех ее задач. Отчетливое представление об этой ее особенности всегда необходимо иметь, чтобы видеть, что именно можно требовать от квантового метода. Прежде всего предполагается всегда участие макроскопических тел в реакциях, для которых формулируются статистически квантовые законы, т. е. законы поведения квантовых частиц. Это участие макроскопических „классических“ тел, обеспечивает сохранение старых „классических“ механических теорий в новой области, но формулированных статистически, чем учитывается роль кванта действия. Теория при этом имеет дело лишь с механическими процес-

сами, оставляя в стороне электродинамику, а также и релятивистские законы, т. е. конечное распространение действий посредством электромагнитного поля. Поэтому эта теория с самого начала не могла быть до конца компетентной во всех тех вопросах, в которых существенен атомизм заряда и в которых нельзя рассматривать электродинамические свойства с чисто механической точки зрения. И действительно, многочисленные попытки дать квантовую теорию электромагнитного поля, пользуясь только квантовыми механическими принципами, т. е., по существу классическими механическими принципами с последовательным учетом кванта действия, были неудачны. Таким образом в настоящее время связь атомизма заряда (постоянная e) и атомизма действия (постоянная $\hbar$) еще совершенно темна.

Однако следует обратить внимание на следующие факты. Классическая электронная теория, основанная Лоренцом, рассматривает электромагнитное поле и, сверх того, вводит представление об электрически заряженных частицах, свойства которых и характеризуются их зарядом. При этом, если пытаться описать свойства этих частиц теми средствами, которыми теория описывает электромагнитное поле, то это не может быть последовательно осуществлено (затруднения с бесконечной собственной энергией и структурой электрона). Это показывает непоследовательность теории, которая наряду с электромагнитным полем оперирует с зарядом. В самое последнее время М. Борну удалось показать, что возможно такое релятивистски инвариантное изменение, точнее, обобщение классической электронной теории Лоренца, при котором отмеченное затруднение, повидимому, устраняется. Эта теория оперирует с нелинейными уравнениями поля, т. е. в ней источники поля не есть нечто стороннее по отношению к нему, а поле создается самим же полем. Вследствие этого в этой теории, собственно, нет постоянной e заряда, а есть постоянные характеризующие поле, именно: максимальные возможные для поля значения (теория Лоренца предполагает, что возможны бесконечно большие напряжения электромагнитного поля).

С другой стороны, мы имеем в настоящее время теорию механических процессов, характеризуемую квантом действия — $\hbar$, о которой и шла здесь речь. Эта теория в ее полной форме — статистического, принципиально неклассического характера. Вместе с тем она не рассматривает электромагнитных процессов и атомизма заряда.

Весьма замечательно, что при современном состоянии теоретической физики, уже имеются указания на новую атомную постоянную — так называемую постоянную тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c},$$

являющуюся отвлеченным числом. Пользуясь этой постоянной (назовем ее „постоянной Зоммерфельда“), мы можем исключить

как заряд e, так и квант действия $\hbar$. Таким образом, если бы было достигнуто такое видоизменение классической нелинейной электродинамики, которое содержало бы постоянную Зоммерфельда, то такая теория, во-первых, была бы „классической", а, во-вторых, содержала бы в себе как два различных предельных случая — электродинамику (постоянная e) и квантовую механику (постоянная $\hbar$).