



А. ЗОММЕРФЕЛДА

СТРОЕНИЕ АТОМА
И СПЕКТРЫ



ATOMBAU UND SPEKTRALLINIEN

von
ARNOLD SOMMERFELD

II BAND

FRIEDR. VIEWEG & SOHN.
BRAUNSCHWEIG 1951

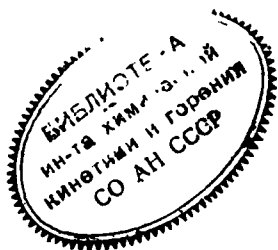
А. ЗОММЕРФЕЛЬД

СТРОЕНИЕ АТОМА И СПЕКТРЫ

ТОМ II

Перевод с немецкого
А. Н. МАТВЕЕВА и Б. В. МЕДВЕДЕВА

Под редакцией
Я. А. СМОРОДИНСКОГО



ГОСУДАРСТВЕННОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТЕХНИКО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1956

АННОТАЦИЯ

Настоящая книга является классической монографией по квантовой механике. Автор — один из создателей квантовой механики. Ему принадлежат решения многих её задач.

Во втором томе даётся оригинальное и во многих разделах отсутствующее на русском языке изложение основных задач квантовой механики.

Книга рассчитана на студентов, аспирантов и научных работников физиков.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора	8
Глава I. Введение в волновую механику. Основные положения и простейшие применения	9
§ 1. Волновое уравнение Шредингера	9
§ 2. Свободный электрон и его длина волны. Первоначальная теория де Бройля	13
§ 3. Разъяснение математических методов: шаровые функции и функции Бесселя	18
§ 4. Прохождение электронных волн через потенциальный порог. Условия непрерывности, туннельный эффект	27
§ 5. Осциллятор и ротатор, их собственные значения по волновой механике	34
§ 6. Обобщение волнового уравнения. Уравнение, зависящее от времени. Случай многих частиц	40
§ 7. Уравнение непрерывности. Ток и плотность. Нормировка и ортогональность. Статистическое толкование волновой функции	45
§ 8. Матричные элементы координат и метод векторного потенциала. Дипольное и квадрупольное излучение	52
§ 9. Нормировка, ортогональность и матричные элементы для осциллятора и ротатора	61
Глава II. Задача Кеплера	70
§ 1. Собственные значения и собственные функции в дискретном спектре	70
§ 2. Представление и свойства полиномов Лагерра. Ортогональность и нормировка. Введение гипергеометрической функции	74
§ 3. Численное и графическое представление собственных функций. Сравнение с прежними представлениями об орбитах	79
§ 4. Учёт движения ядра	83
§ 5. Правила отбора и интенсивности в задаче Кеплера	86
§ 6. Эффект Зеемана. Диа- и парамагнетизм	91
§ 7. Непрерывный спектр водорода, его собственные значения и собственные функции	100
§ 8. Ортогональность и нормировка в непрерывном спектре. Вопросы интенсивностей	107
§ 9. Задача Кеплера в параболических координатах	113
§ 10. Общие соображения относительно спектральных серий для случая одного оптического электрона и относительно симметрии атомных оболочек	120
§ 11. Теория полосатых спектров. Вращательные и вращательно-колебательные спектры двухатомных молекул	129
§ 12. Молекула как симметричный волчок	135
Глава III. Общие идеи и методы	141
§ 1. Волновые пакеты	141
§ 2. Квантовомеханическое истолкование классических величин	143
§ 3. Операторное исчисление. Операторы импульса и момента количества движения	150
§ 4. Сопряжённые операторы. Общее рассмотрение матричных элементов	158

§	5. Матричная механика. Пример с осциллятором	161
§	6. Соотношение неопределённостей	167
§	7. Теория представлений	171
Глава IV. Теория Дирака		179
§	1. Релятивистское уравнение Шредингера	179
§	2. Переход к уравнению Дирака. Магнитный и механический моменты электрона	186
§	3. Сопряжённое уравнение Дирака. Четырёхмерный вектор тока	195
§	4. Пример — свободное движение электрона	199
§	5. Группа гиперкомплексных чисел и её подгруппы — кватернионы и бикватернионы	203
§	6. Инвариантность относительно преобразований Лоренца	219
§	7. Задача Кеплера и формула тонкой структуры	229
§	8. Квантовые числа, характеризующие уровни тонкой структуры. Подробное исследование собственных функций	240
§	9. Ортогональность и нормировка. Правило отбора	251
§	10. Непрерывный спектр водорода. Отрицательные уровни энергии. Открытие позитрона	258
§	11. Парадокс Клейна	270
§	12. Поляризация волн материи	282
Глава V. Теория возмущений		293
§	1. Теория возмущений Шредингера, особенно в случае вырожденных систем	293
§	2. Эффект Штарка	301
§	3. Теория дисперсии	308
§	4. Теория возмущений Дирака для нестационарных задач	324
§	5. Общие замечания о задачах столкновения. Приближение Борна	328
§	6. Формула Резерфорда и её обобщение	336
§	7. Дифракция электронов на кристаллах и вопросы интерференции	343
§	8. Поправка на спин как возмущение	348
§	9. Аномальный эффект Зеемана	362
Глава VI. Фотозффект		372
§	1. Введение и исторический обзор	372
§	2. Фотозффект в K -оболочке, стационарный случай. Расчёт в полярных координатах	375
§	3. Обсуждение отклонения электронов вперёд. Разрешение относящегося сюда парадокса	383
§	4. Фотозффект в K -оболочке с полным учётом запаздывания в параболических координатах	388
§	5. Коэффициент поглощения в K -оболочке	395
§	6. Фотозффект в L -оболочке	401
§	7. Фотозффект с точки зрения нестационарной теории возмущений	406
§	8. Фотозффект для очень жёсткого излучения; релятивистская поправка	410
Глава VII. Сплошной рентгеновский спектр		421
§	1. Историческое введение и обзор	421
§	2. Матричный элемент для элементарного процесса	423
§	3. Интенсивность и поляризация в сплошном рентгеновском спектре	434
§	4. Распределение электронов по направлениям при торможении	442
§	5. Полная потеря излучения	444
§	6. Запаздывание и опережение	446
§	7. Очень жёсткие лучи, первое приближение по теории Дирака	452
§	8. Специальное приближение для мягкого рентгеновского излучения при торможении протонов. Астрофизические приложения	471
Глава VIII. Эффект Комптона		479
§	1. Общий обзор	479
§	2. Метод матричных элементов	481
§	3. Метод запаздывающих потенциалов	489

§ 4.	Эффект Комптона на свободных электронах по уравнению Дирака	495
§ 5.	Эффект Комптона на связанных электронах. Атомный фактор, соотношение между комптоновским и релеевским рассеянием	507
§ 6.	Ширина и форма комптоновской линии	513
Глава IX. Спектр гелия и молекула водорода. Проблема химической связи		523
Исторический обзор	1. Исторический обзор	523
	2. Обменное вырождение в спектре гелия. Орто- и парасостояния	526
	3. Молекула водорода и гомеополлярная связь	534
	4. Аналитические и численные дополнения	539
	5. Волномеханическое понимание принципа Паули	549
	6. Орто- и параводород	553
	7. Вопросы строения ядра. Статистика Бозе и статистика Ферми	557
	8. Рассеяние одинаковых частиц	560
Глава X. Приближенные методы вычисления собственных функций		567
Математические дополнения	1. Метод Хиллерааса, основное состояние гелия	567
	2. Дальнейшее развитие метода Хиллерааса. Отрицательный ион атомного и положительный ион молекулярного водорода	574
	3. Статистическая модель атома Томаса—Ферми	578
	4. Применение к периодической системе	583
	5. Дальнейшие применения и дополнения	586
	6. Метод «самосопряженного поля» Хартри	589
	7. Метод Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна	592
Математические дополнения		598
1.	Введение групповой скорости. К гл. I, § 2, равенство (14)	598
2.	Критерий двухчленности рекуррентной формулы. Метод полиномов. К гл. I, § 3	599
3.	Гамильтонова функция электрона. О нормировке электродинамического потенциала и калибровочной инвариантности. К гл. I, § 6, Б и Г	603
4.	Общие замечания о сопряженном уравнении. Вариационный принцип волновой механики. К гл. I, § 7	606
5.	О мультипольном излучении. К гл. I, § 8 и гл. II, § 6 и 7	610
6.	Рекуррентные формулы для сферических функций и им родственных. К гл. I, § 9 и гл. IX, § 4	625
7.	Общее представление гамма-функции. К гл. II, § 7	631
8.	Дальнейшие сведения о нормировке и ортогональности собственных функций. К гл. II, стр. 77 и гл. IV, стр. 253	632
9.	Формула Морзе в теории полосатых спектров. К гл. II, § 12	641
10.	Преобразование волнового уравнения к общим криволинейным координатам, исключение дополнительных условий. К гл. II, § 12, равенство (8)	644
11.	К доказательству теоремы о центре тяжести, теоремы площадей и т. д. к гл. III, § 2	654
12.	Дополнения к теоремам об операторах момента количества движения. К заключению гл. III § 3	656
13.	Двухрядные и четырехрядные матрицы. Представление гиперкомплексных единиц γ через матрицы. К гл. IV, § 5	660
14.	Вариационный принцип в теории Дирака. К гл. IV, § 3	665
15.	Математические дополнения к релятивистской проблеме Кеплера. К гл. IV, § 7	667
16.	Интегральное представление и асимптотическое поведение гипергеометрических функций. К гл. IV, § 10 и гл. VII, § 8	672
17.	Относительно параметров Клейна $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ и значение этих параметров для теории Дирака. К последней части гл. IV, § 6	684
Алфавитный указатель		691

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Второй том книги Зоммерфельда посвящён следующему этапу развития теории атомных спектров — квантовой механике. Книга Зоммерфельда — не обычный курс квантовой механики; он не богат количеством решённых задач. Его характерная особенность (отличающая и первый том книги) — глубокое и подробное изложение основных проблем квантовой механики в таком виде, что читатель ощущает все детали пути, которым автор находит решение задачи. Автор самым подробным образом рассказывает о всех деталях расчётов, о всех возникающих и ликвидируемых парадоксах, об опытах, которые привели к постановке задачи, и об опытах, доказавших справедливость теории; он никогда не отсылает читателя к математическим книгам за подробностями об уравнениях или функциях; напротив, все математические вычисления и исследования проводятся здесь же и в столь красивой форме (особенно, когда дело касается интегральных преобразований, в которых Зоммерфельду принадлежат классические исследования), что математические разделы книги оказываются не менее интересными, чем и физические.

Чтение книги Зоммерфельда должно дать читателю яркое представление о большом этапе развития науки, полученное от одного из её активных создателей.

Но, конечно, книга имеет не только исторический интерес. Ряд задач, изложенных в книге (фотоэффект, рентгеновское излучение и др.), представлены с полнотой, с которой они нигде в курсах больше не излагались; и в этих вопросах книга остаётся незаменимым справочником.

Книга Зоммерфельда — яркий пример классического произведения, не утратившего своего значения через много лет после его создания.

Эта книга, однако, резко индивидуальна. Автор в основном описывает те задачи, в исследовании которых он сам принимал непосредственное участие, или те работы, которые ему были более близки. Однако книга и не предназначалась для читателя, который только начинает изучать квантовую механику. Читатель же, знающий основы этой науки, найдёт здесь огромное количество интересного и полезного для себя. Книгу Зоммерфельда бессмысленно пытаться дополнить примечаниями и новыми ссылками — сделать это с исчерпывающей полнотой невозможно; её пробелы следует восполнить чтением других книг по квантовой механике, которых сейчас много. Лишь в нескольких местах, где произошли существенные изменения в физических воззрениях, мы позволим себе добавить несколько слов в примечаниях.

Я. Смородинский

ГЛАВА I

ВВЕДЕНИЕ В ВОЛНОВУЮ МЕХАНИКУ. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ПРОСТЕЙШИЕ ПРИМЕНЕНИЯ

§ 1. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Мы часто сталкиваемся с противопоставлением макроскопических и микроскопических явлений. Так, например, макроскопическая картина состояния теплового равновесия выглядит совершенно иначе, чем микроскопическая картина, основанная на кинетической теории газов. Макроскопическими по своему существу являются механика и электродинамика. Применять к атомным процессам законы макроскопического мира значило бы, вообще говоря, предъявлять необоснованные требования к природе. Однако ряд важных успехов теории говорили в пользу такой экстраполяции в микроскопическую область. Изучение внутриатомных электронных орбит, оказавшееся столь плодотворным для общего познания атома, в особенности для расшифровки спектров, основывалось на классической механике, а методы, связанные с принципом соответствия, которыми мы пользовались при рассмотрении вопросов интенсивностей и поляризации, были заимствованы из классической электродинамики. К классическим принципам были добавлены лишь две квантовые аксиомы. Мы сформулируем их кратко, ссылаясь на уравнение (20), гл. II, § 3, I тома и уравнение (6), гл. I, § 6, I тома, в виде двух уравнений:

$$\int p dq = nh \quad (\text{квантовое условие}), \quad (1)$$

$$h\nu = E_1 - E_2 \quad (\text{условие частот}). \quad (2)$$

Первое из них определяет выделенные или стационарные состояния атома (в общем случае — изучаемой системы) и сопоставляет им целые числа («квантовые числа») n ; второе определяет излучение при переходе из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 ¹⁾.

¹⁾ В дальнейшем через E мы будем обозначать полную энергию и отличать её от энергии W , не включающей энергии, связанной с существованием массы покоя. Так, например, для отдельного электрона

$$E = m_0c^2 + W;$$

$E_0 = m_0c^2$ называется энергией покоя электрона; энергия W складывается в общем случае из кинетической и потенциальной энергии, причём последняя определена лишь с точностью до постоянного слагаемого. В релятивистском случае удобной мерой энергии представляется полная энергия E ; в нерелятивистском случае удобно и, как мы увидим в следующем параграфе, достаточно использовать W . Очевидно, что в (2) мы можем заменить $E_1 - E_2$ на $W_1 - W_2$.

Однако с самого начала ряд фактов указывал на то, что законы механики, даже дополненные с точки зрения квантовой теории, не вполне описывали реальную действительность. Особенно простой частный случай их несостоятельности обнаружился при рассмотрении вопроса о вращательных полосатых спектрах молекул. Для достижения согласия с опытом последние пришлось нумеровать не целыми, а полуцелыми числами (ср. рис. 138 в I томе). Такого рода примеры свидетельствовали о глубоком различии между микро- и макромеханикой.

Каким же образом можем мы без слишком большого произвола построить *микромеханику*, приспособленную к атомным явлениям? Следуя Эрвину Шредингеру¹⁾, будем исходить из всеобъемлющей аналитической системы *гамильтоновой механики*²⁾. Гамильтон развивал эту систему в связи со своими исследованиями по геометрической оптике астрономических инструментов, находясь при этом под влиянием представлений возникшей тогда (с 1828 по 1837 г.) волновой оптики.

Волновая оптика описывает оптические процессы с помощью линейных дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка и получает из них волновые поверхности (поверхности равной фазы). Световые лучи тогда определяются, по крайней мере в изотропных средах, как ортогональные траектории к волновым поверхностям.

С другой стороны, геометрическая оптика (или оптика световых лучей) была первоначально механикой световых корпускул Ньютона; световые лучи имели смысл траекторий этих корпускул; ортогонально к ним располагались волновые поверхности. Если $S = \text{const}$ — уравнение этих поверхностей, то S удовлетворяет дифференциальному уравнению в частных производных первого порядка и второй степени. Это уравнение и есть уравнение Гамильтона в частных производных, причём S означает, в соответствии с нашими прежними обозначениями т. I, гл. II, § 6, гамильтонову характеристическую функцию или «действие». Мы сразу приходим, таким образом, к дифференциальному уравнению и к функции действия для отдельной материальной точки (отдельной световой корпускулы) и без труда (используя многомерное рассмотрение) распространяем этот метод на произвольные механические системы.

Проделаем теперь путь Гамильтона в обратном направлении. В то время как Гамильтон, исходя из волновой оптики, пришёл через геометрическую оптику к общей формулировке макроскопической механики, мы, следуя Шредингеру, перейдём через геометрическую и волновую оптику от макромеханики к микромеханике. Мы хотим получить микромеханику, которая уточняет макромеханику и делает её применимой к системам атомных размеров, подобно тому как волновая оптика является уточнением геометрической для расстояний порядка длины световой волны.

Мы начнём с макромеханики отдельной материальной точки в прямоугольных координатах. Исходя из закона сохранения энергии:

$$\frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = W - V \quad (3)$$

¹⁾ Основные работы Шредингера появились в журнале *Ann. d. Phys.* в 1926 г. под заглавием «Квантование как проблема собственных значений», первое и второе сообщения в томе 79, третье сообщение в 80, четвёртое сообщение в 81; далее в томе 79: «Об отношении квантовой механики Гейзенберга — Борна — Йордана к моей». Они были объединены в монографию «*Abhandlungen zur Wellenmechanik*», Leipzig, 1927.

²⁾ Относительно происхождения гамильтоновой теории см., наряду с замечаниями, приведёнными в гл. II, § 6 I тома, также Ф. Клейна, Развитие математики в XIX столетии, т. I, гл. 5, М. — Л., 1937.

(постоянная W — энергия, V — потенциальная энергия, зависящая только от координат x, y, z), мы получим, следуя общим правилам [т. I, гл. II, § 6, уравнение (18)], уравнение Гамильтона в частных производных:

$$\Delta_1 S = 2m(W - V), \quad \Delta_1 S = \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2. \quad (4)$$

Величина Δ_1 называется «первым дифференциальным параметром» в отличие от «второго дифференциального параметра» Лапласа Δ . С другой стороны, мы напомним дифференциальное уравнение волновой оптики:

$$\Delta u = \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad \Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (5)$$

в котором u — компонента оптического поля в прямоугольных координатах, a — фазовая скорость света (вообще говоря, меняющаяся от точки к точке). Оставляя рассмотрение временной зависимости до следующего параграфа, введём монохроматическую волну:

$$u = \psi e^{\pm i\omega t}. \quad (5a)$$

Положим

$$\frac{\omega}{a} = k$$

и будем называть k «волновым числом». Это название оправдывается тем, что в случае плоской волны k оказывается равным $\frac{2\pi}{\lambda}$, где λ — длина волны, т. е. пространственный период плоской волны. Введём ещё показатель преломления n относительно вакуума (индекс 0 будет относиться к вакууму, так что a_0 есть обычная скорость света c):

$$\left. \begin{aligned} n &= \frac{a_0}{a} = \frac{c}{a}, \\ k &= nk_0. \end{aligned} \right\} \quad (5b)$$

В таких обозначениях из (5) и (5a) следует:

$$\Delta\psi + n^2 k_0^2 \psi = 0. \quad (6)$$

Совершим здесь переход к геометрической оптике, следуя в рассуждениях идеем Дебая¹⁾: в геометрической оптике мы считаем длину волны λ_0 «малой» и, следовательно, k_0 — «большим» («малая» означает: бесконечно малая по отношению ко всем встречающимся размерам оптической аппаратуры). Напишем:

$$\psi = A e^{ik_0 S}. \quad (6a)$$

Множитель q введён из соображений размерностей: поскольку S имеет размерность действия (*эрг · сек*), то $k_0 q$ должно обладать размерностью обратного действия. Мы будем рассматривать A и S в (6a) как «медленно меняющиеся величины», т. е. будем пренебрегать в производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \left(ik_0 q A \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial x} \right) e^{ik_0 q S}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \left[-k_0^2 q^2 A \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + ik_0 q A \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + 2ik_0 q \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right] e^{ik_0 q S} \end{aligned}$$

всеми степенями k_0 по сравнению с наибольшей. Тогда после сокращения

¹⁾ A. Sommerfeld u. J. Runge, Ann. d. Phys. 35, 290 (1911).

на k_0^2 уравнение (6) перейдет в

$$\Delta_1 S = \frac{n^2}{q^2}. \quad (7)$$

Это уравнение является основным для геометрической оптики дифференциальным уравнением «эйконала». Сравнение с (4) приводит к

$$n^2 = 2mq^2(W - V). \quad (8)$$

Таким образом, гамильтонова механика, если толковать её с точки зрения геометрической оптики, оперирует с переменным показателем преломления, определяемым значением V . Нечто похожее получается при рассмотрении криволинейного распространения световых лучей в воздушных слоях земной атмосферы.

Если подставить полученное значение n в дифференциальное уравнение (6) волновой оптики, то получим уравнение волновооптического варианта механики:

$$\Delta\psi + 2m(qk_0)^2(W - V)\psi = 0. \quad (9)$$

Надо ещё выбрать неопределённый пока множитель q . Мы уже отмечали, что произведение qk_0 имеет размерность обратного действия. Поэтому положим ¹⁾, вводя тем самым безразмерный множитель f :

$$qk_0 = \frac{2\pi}{h}f = \frac{f}{h}. \quad (10)$$

В следующем параграфе мы покажем, что f следует положить равным единице. Принимая это пока без доказательства, мы получим из (9) в качестве окончательного дифференциального уравнения микромеханики в простейшем случае (одна материальная точка, консервативное силовое поле)

$$\Delta\psi + \frac{2m}{h^2}(W - V)\psi = 0. \quad (11)$$

Мы будем называть это уравнение *волновым уравнением* ²⁾, ψ — *волновой функцией* и рассматривать (11) как основу *волновой механики*.

Сделаем замечание к интегрированию волнового уравнения. Задача состоит в том, чтобы найти такие интегралы ψ , которые однозначны и непрерывны во всей области изменения координат, включая и граничные точки. Появляющееся таким образом требование непрерывности, включая граничные точки, потрясающим образом полностью заменяет наше квантовое условие (1). Входящее в (1) квантовое число n возникает само собой при решении возникающей «краевой задачи». Наше квантовое условие (1) оказывается таким образом излишним в качестве самостоятельной аксиомы. Положение вещей здесь аналогично положению в краевых задачах обычной механики, например в задаче о колеблющейся струне, где также с помощью граничных условий (закрепление струны на концах) вводится целое число n ,

¹⁾ После работ Дирака стало общепринятым использовать обозначение \hbar для $\frac{h}{2\pi}$; мы это использовали в (10) и (11). Такое \hbar появляется в квантовой механике очень часто. Несмотря на это, основной константой квантовой теории остаётся первоначальное планковское h . Это проявляется в квантовом условии (1), в выражении h^3 для элементарного объёма фазового пространства, в формулах для длины волны Комптона и де Бройля и т. д.

²⁾ Сам Шредингер использовал сперва название «волновое уравнение» для аналогичного (5) уравнения, зависящего от времени. Для отличия от (11) мы будем называть последнее «временным волновым уравнением».

характеризующее различные формы колебаний основного тона и обертонов и равное (увеличенному на единицу) числу узлов.

Чтобы сделать (в известном смысле) излишним в волновой механике и условие частот (2), мы должны прежде всего дополнить наше уравнение, вводя зависимость от времени.

§ 2. СВОБОДНЫЙ ЭЛЕКТРОН И ЕГО ДЛИНА ВОЛНЫ. ПЕРВОНАЧАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ДЕ БРОЙЛЯ

В качестве простейшего примера применения волнового уравнения мы рассмотрим движение материальной точки при отсутствии сил. Из (1.11)¹⁾ при $V = 0$ имеем:

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0; \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} W. \quad (1)$$

Проинтегрируем дифференциальное уравнение так же, как и в оптической задаче о плоской волне. Выбирая в качестве выделенного направления положительное направление оси x , пишем:

$$\psi = Ae^{ikx}. \quad (2)$$

Область изменения координаты x простирается от $x = -\infty$ до $x = +\infty$. Решение однозначно и непрерывно во всей области, включая граничные точки, и удовлетворяет, следовательно, нашему общему краевому условию, и притом для каждого положительного значения W . Поэтому, в то время как в других случаях граничному условию можно удовлетворить только при специальном выборе значения энергии, здесь энергия остаётся произвольной. Если мы положим $W = \frac{mv^2}{2}$, то из (1) получится

$$k = \frac{mv}{\hbar}. \quad (3)$$

Таким образом, пространственный период нашей ψ -функции (т. е. длина волны λ) будет равен

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{mv}. \quad (4)$$

Но это есть знаменитая *формула де Бройля*, приписывающая длину волны трансляционному движению материальной точки. Действительно, Луи де Бройль²⁾ получил это соотношение в своей диссертации (Париж, 1924) ещё до появления работ Шредингера. Тем самым в физику был введён принцип *двойственности*³⁾, который вскоре должен был принести богатые экспериментальные плоды (Дэвиссон и Джермер, 1927) и который является самым поразительным из всех замечательных открытий этого столетия: двойственная природа света как световой волны и светового кванта

¹⁾ Запись (1.11) означает § 1, уравнение (11). Мы будем в дальнейшем всё время принимать это сокращённое обозначение, при ссылках на предыдущие главы дополнять его номером соответствующей главы (I, II, ...).

²⁾ Опубликовано в *Journal de Phys.* 7 (1926).

³⁾ Вместо двойственности по предложению Бора предпочитают говорить о *дополнительности*, чтобы подчеркнуть, что оба аспекта, корпускулярной и волновой, взаимно дополняют друг друга, причём в зависимости от поставленной задачи следует использовать иногда один, иногда другой, без опасения, что они придут в противоречие друг с другом. (*Прим. авт.*)

Понятие «дополнительности» в квантовой механике оказалось источником идеалистических философских построений, которые привели к противопоставлению этого понятия понятию причинности. См. по этому поводу, например, статью В. А. Фока [*УФН* 45, 3 (1951)]. (*Прим. ред.*)

переносится на электрон и далее на всю материю; наряду с её корпускулярной природой и теоретически и экспериментально устанавливается как равноправная её волновая природа.

Формальное обобщение выражения (2) (также подсказываемое обычной оптикой) на случай электрона, движущегося в произвольном направлении (α , β , γ), получается, если положить

$$\psi = Ae^{ik(\alpha x + \beta y + \gamma z)}, \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1, \quad (5)$$

что можно записать короче в виде

$$\psi = Ae^{i(kr)}. \quad (6)$$

Здесь k — волновой вектор с компонентами

$$k_x = k\alpha, \quad k_y = k\beta, \quad k_z = k\gamma. \quad (6a)$$

Ясно, что выражение (5) также удовлетворяет дифференциальному уравнению (1).

Мы приходим теперь ко второму фундаментальному положению первоначальной теории де Бройля.

Де Бройль приписывает каждой системе с энергией E или массой m частоту ν с помощью двойного соотношения Эйнштейна:

$$E = mc^2 = h\nu. \quad (7)$$

Первым из двух объединённых здесь утверждений является закон инертности энергии (т. I, гл. I, § 7), а вторым — уравнение Эйнштейна для фотоэффекта в его максимально упрощённой форме (т. I, гл. I, § 6). При этом m означает здесь не массу покоя (как в формуле $\frac{mv^2}{2}$ для кинетической энергии), а полную массу, соответствующую всей имеющейся у системы энергии.

Введением частоты ν де Бройль обобщает пространственное состояние ψ , которое определяется из уравнения Шредингера, в пространственновременной процесс

$$u = \psi e^{-2\pi i \nu t} = \psi e^{-i\omega t}. \quad (8)$$

Здесь в силу (7)

$$\omega = \frac{E}{h}. \quad (9)$$

Знак перед i в показателе в (8) сам по себе произволен, мы будем предпочитать использованный в (8) знак минус.

Возвращаясь к частному случаю плоской волны (свободный электрон) (2), напомним:

$$u = Ae^{i(kx - \omega t)}. \quad (10)$$

Показатель имеет смысл «фазы» волны. Условием постоянства фазы будет

$$k dx - \omega dt = 0.$$

Отсюда мы получаем «фазовую скорость», которую мы, как и в (1.5), будем обозначать через a :

$$a = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}. \quad (11)$$

Если подставить сюда ω из (9) и k из (3), то получим¹⁾:

$$a = \frac{E}{mv}$$

¹⁾ Здесь возникла известная непоследовательность, поскольку m означало в (7) полную массу, в то время как первоначально в (3) — массу покоя соответственно вы-

и в силу (7)

$$a = \frac{c^2}{v}. \quad (12)$$

Так как $v < c$, то отсюда следует $a > c$. Фаза волн де Бройля распространяется со сверхсветовой скоростью.

С другой стороны, покажем, что v играет для нашего волнового процесса (2) роль *групповой скорости*. Обозначим последнюю через b ; тогда наше утверждение будет гласить:

$$v = b, \quad ab = c^2. \quad (13)$$

Определением групповой скорости служит, в отличие от уравнения (11) (ср. дополнение 1 в конце этого тома):

$$b = \frac{d\omega}{dk}. \quad (14)$$

Для доказательства (13) мы напишем, используя (9) и (3),

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \left(\dots + \frac{mv^2}{2} + \dots \right), \quad k = \frac{mv}{\hbar}. \quad (15)$$

Многоточия означают, что к выписанному члену добавляются ещё постоянная энергия покоя и дальнейшие члены, которые учитывают релятивистское изменение массы. Дифференцируем по v :

$$d\omega = \frac{m}{\hbar} v dv, \quad dk = \frac{m}{\hbar} dv \quad (16)$$

и, следовательно, в соответствии с нашим утверждением (13)

$$b = \frac{d\omega}{dk} = v.$$

То, что скорость v нашей частицы соответствует не скорости a пространства монохроматической волны, но скорости b распространения группы волн, имеет общее значение. Физическую картину движущейся материальной частицы составляет не монохроматическая волна, но *группа волн* или, как говорят, *волновой пакет*.

Чтобы полностью охарактеризовать первоначальную точку зрения де Бройля, надо сделать ещё следующее замечание: де Бройль принимал за материальное ядро волновой системы, которой он заменял частицу, ту точку, в которой волновая функция обращалась в бесконечность (особую точку). Тем самым вместо математической однозначности, которая господствует в позднейшей теории собственных функций Шредингера, возникал элемент определённого физического произвола. Мы рассматриваем поэтому теорию де Бройля как знаменательную предвестницу волновой механики, но не как её окончательную математическую формулировку.

С понятиями «фазовая скорость» и «групповая скорость» связана возможность восполнения пробела, который сохранился у нас в первом параграфе при выводе волнового уравнения: определение численного множителя f в (1.10). Мы положили тогда произвольно $f = 1$, теперь мы докажем¹⁾ это, исходя из требования, что связанная с фазовой скоростью волн

воду (3) из обычной формулы для кинетической энергии. Мы отложим разъяснение этого пункта до конца параграфа.

¹⁾ То же делает Шрединггер в своих лекциях по волновой механике, прочитанных в Королевском обществе в Лондоне, немецкий перевод: Jul. Springer, Berlin, 1928. (русский перевод: Э. Шрединггер, Четыре лекции по волновой механике, Харьков — Киев, 1936).

материи групповая скорость должна точно совпадать со скоростью частицы v . Последнее требование и прежнее утверждение $f = 1$ действительно эквивалентны: поскольку мы уже положили ранее $f = 1$, мы смогли доказать наше предложение относительно групповой скорости; если мы теперь откажемся от доказательства и сочтём физически разумным постулировать содержание этого предложения, то мы сможем доказать утверждение $f = 1$.

Мы будем исходить из уравнения (1.11), в котором при неопределённом f ко второму члену добавляется множитель f^2 . Поэтому теперь значением k в (1) будет

$$k^2 = \frac{2m}{h^2} W f^2, \quad k = \frac{mv}{h} f. \quad (17)$$

Тогда из (11) следует

$$a = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{vf}.$$

С другой стороны, из (15) и (17) получается

$$d\omega = \frac{mv}{h} dv, \quad dk = \frac{mf}{h} dv.$$

Поэтому определение (14) групповой скорости даёт

$$b = \frac{v}{f};$$

тем самым

$$f = 1 \quad (18)$$

вследствие нашего постулата $b = v$.

Мы подходим теперь к выяснению отмеченной в примечании 1 на стр. 14 непоследовательности в понимании m как массы покоя, с одной стороны, и как полной массы, — с другой. Нам надо теперь показать, что при строго релятивистском рассмотрении m в формуле де Бройля (4) действительно имеет смысл полной массы.

При этом мы оказываемся перед той трудностью, что основные положения волновой механики, насколько они были до сих пор развиты, недостаточны для релятивистских вычислений. Если бы мы хотели проделать в релятивистском случае тот же путь к обоснованию (1), что и в начале этого параграфа, то мы должны были бы исходить не из уравнения Шредингера, а из его релятивистского обобщения, именно, в случае электрона — из уравнения Дирака. Мы проделаем это в гл. IV, § 4 и получим вновь формулу де Бройля в качестве условия наличия у уравнения Дирака экспоненциальных решений, но с

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (19)$$

Однако здесь, чтобы не предвосхищать дальнейшего, обойдёмся, как это сделано в диссертации де Бройля, преобразованием Лоренца. Вывод получается тогда правда не совсем убедительным, но подкупает тем, что опирается непосредственно на основные положения теории относительности и волновой механики. Итак, мы будем рассматривать движущуюся вместе с частицей «систему покоя» x_0, t_0 и «систему наблюдателя» x, t , в которой частица обладает скоростью v . Тогда

$$x_0 = \frac{x - vt}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad t_0 = \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1-\beta^2}}. \quad (20)$$

Применим теперь уравнение (7) один раз в системе покоя, другой раз

в системе наблюдателя:

$$E_0 = m_0 c^2 = h\nu_0, \quad E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = h\nu.$$

Отсюда следует

$$\nu_0 = \sqrt{1-\beta^2} \nu. \quad (21)$$

Естественно рассматривать волновой процесс в системе покоя, в которой никакое направление не выделено, как функцию только от времени. Если мы изберём для этой функции тот же вид, что и в (8), но с $\psi = \text{const} = A$, то получим:

$$u = Ae^{-2\pi i\nu t_0} \quad (22)$$

В силу (20) и (21) в системе наблюдателя этому будет соответствовать

$$u = Ae^{-2\pi i\nu \left(t - \frac{v}{c^2} x\right)}. \quad (22a)$$

Если написать здесь, как и в (10),

$$u = Ae^{-i\omega t + ikx}, \quad (22b)$$

то, учитывая (7), найдём

$$k = 2\pi\nu \frac{v}{c^2} = 2 \frac{\pi}{h} m\nu, \quad (22в)$$

и, следовательно, длина волны де Бройля будет равна

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{m\nu}, \quad (23)$$

причём здесь m — полная масса. Из соотношения (22a) можно непосредственно получить и значение фазовой скорости, если положить там дифференциал показателя равным нулю, именно:

$$\frac{dx}{dt} = a = \frac{c^2}{v} \quad (24)$$

в согласии с (12).

Таким образом, представляющееся сначала столь мало привлекательным значение $a > c$ оказывается не чем иным, как обратным значением коэффициента в лоренцевом преобразований (20).

Надо ещё проверить, что при таком релятивистском обобщении формулы де Бройля остаётся в силе фундаментальное соотношение между групповой скоростью волны и скоростью частицы. Для этого, учитывая, что $\omega = E/h$ (7) и что $k = mv/h$ (22в), вычислим

$$b = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{d(mv)} = \frac{c^2 dm}{v dm + m dv} = \frac{c^2}{v + m \frac{dv}{dm}}. \quad (25)$$

Но

$$\frac{dm}{dv} = \frac{m_0}{c} \frac{\beta}{(1-\beta^2)^{3/2}}, \quad \frac{dv}{dm} = \frac{c^2}{m} \frac{1-\beta^2}{v},$$

откуда

$$b = \frac{c^2}{v + c^2(1-\beta^2)/v} = \frac{c^2 v}{v^2 + c^2 - c^2 \beta^2}, \quad (25a)$$

так что действительно

$$b = v. \quad (26)$$

Из изложенного выше могло бы создаться впечатление, что полагать,

как это сделано в (7), $h\nu = E$ физически необходимо. Однако это не так. Правда, для релятивистского рассмотрения, как мы уже отмечали это в примечании к стр. 9, нормировка энергии $E = m_0c^2 + \mathcal{W}$ является заданной. Однако для собственно теории Шредингера такое определение является ненужным и будет более естественным заменить (7) на

$$h\nu \Rightarrow E - E_0 = \mathcal{W}, \quad \omega = \frac{\mathcal{W}}{\hbar}. \quad (27)$$

Для предварительного обоснования этого надо заметить, что даже при обобщённой по сравнению с (27) нормировке

$$h\nu = \mathcal{W} + C \quad (C \text{ произвольно}) \quad (27a)$$

групповая скорость, поскольку она в силу (25) зависит только от dE (или $d\mathcal{W}$), не меняется. Меняется только фазовая скорость, которая, однако, является чисто фиктивной вычислительной величиной. Собственно физическими величинами в волновой механике являются не волновая функция u с её произвольной, в силу (27a), временной зависимостью, но получаемые из неё величины: поток и плотность (см. § 7). Плотность, задаваемая, как будет показано в § 7, выражением $|u|^2$, естественно, не будет зависеть для рассматриваемого здесь свободного движения от выбора временной зависимости. То же самое будет справедливо и для потока, равного произведению плотности на групповую скорость.

Мы положили в этом параграфе $V = 0$, т. е. нормировали специальным образом и потенциальную энергию. В конце дополнения 3 будет показано, что это можно сделать, не изменяя физических величин [специальный случай гораздо более общей «градиентной инвариантности»]. Свобода в нормировке V связана, конечно, с произволом (27a) в выборе временной зависимости. Именно, поскольку \mathcal{W} является суммой кинетической и потенциальной энергий, то перенормировка V на постоянную C означает и изменение \mathcal{W} на ту же самую постоянную. Определённым является лишь значение разности $\mathcal{W} - V$, которая играет роль волномеханической замены для кинетической энергии; именно этот смысл имеет $\mathcal{W} - V$ в уравнении (1.3) и в уравнении Шредингера (1.11).

§ 3. РАЗЪЯСНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ: ШАРОВЫЕ ФУНКЦИИ И ФУНКЦИИ БЕССЕЛЯ

В дальнейшем нам постоянно будут встречаться линейные дифференциальные уравнения, которые следует интегрировать так, чтобы решения их были в некоторой заданной области однозначны и непрерывны, включая и граничные точки. Как правило, это возможно только в тех случаях, когда дифференциальное уравнение содержит подходящий параметр, которому можно придавать нужные значения. Такие значения называются *собственными значениями*, а соответствующие решения — *собственными функциями*. Вся теория была развита первоначально для задачи о колеблющейся струне с меняющимся от точки к точке распределением масс, или, что то же самое, для задачи о распространении тепла в стержне с меняющейся от точки к точке теплопроводностью (задача Штурма-Лиувилля)¹⁾. Мы дадим из этой теории только сведения, безусловно необходимые для изложения, иллюстрируя их на частных примерах.

¹⁾ Мы рекомендуем читателю для справок по этому параграфу и всем относящимся к граничным задачам математическим вопросам превосходную монографию Куранта и Гильберта «Методы математической физики», Гостехиздат, т. I, 1952 и т. II, 1945.

А. Шаровые функции. При рассмотрении трёхмерного уравнения колебаний

$$\Delta u + k^2 u = 0,$$

которое встречается, например, в акустике, в случае сферически-симметричной краевой задачи вводят полярные координаты r, ϑ, φ . Тогда известным образом получается

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + k^2 u = 0. \quad (1)$$

Будем решать это уравнение методом разделения переменных, т. е. полагаем:

$$u = R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi).$$

В то время как R полностью определится только граничным условием, Θ и Φ определяются с точностью до остающегося произвольным целого числа из требования однозначности и непрерывности решения в областях изменения переменных

$$0 \leq \vartheta \leq \pi, \quad -\pi \leq \varphi \leq +\pi.$$

Рассмотрим сначала $\Phi(\varphi)$. Мы можем назвать φ *циклической* координатой, поскольку она не входит явно в дифференциальное уравнение (1). Соответственно этому можем положить $\Phi(\varphi) = e^{\pm im\varphi}$, причём требование однозначности приводит к целому m . До тех пор, пока мы оставляем двойной знак в показателе экспоненты, можно считать m положительной величиной, что мы и будем пока делать.

Подставим Φ в дифференциальное уравнение, разделим последнее на $R\Theta\Phi$ и умножим на r^2 . Тогда имеем:

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + k^2 R \right) = -\frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left\{ \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right\} + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta}. \quad (1a)$$

Общее значение правой и левой частей должно равняться некоторой постоянной, скажем λ . Отсюда получаем дифференциальное уравнение для Θ :

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left\{ \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta = 0. \quad (16)$$

«Постоянная разделения» λ играет для этого уравнения роль параметра, который принимает определённые «собственные» значения. Введём в качестве новой независимой переменной $x = \cos \vartheta$, положим $\Theta(\vartheta) = y(x)$ и заметим, что

$$\sin \vartheta d\vartheta = -dx, \quad \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} = -(1-x^2)y'.$$

Тогда из (16) получится

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right) y = 0. \quad (2)$$

Полученное уравнение является уравнением для *общих* (так называемых *присоединённых*) *шаровых функций*. Произведение $y(\cos \vartheta)\Phi(\varphi)$ является *сферической*, так называемой *тессеральной*¹⁾, функцией.

Сделаем сначала несколько общих замечаний относительно линейных дифференциальных уравнений, в частности относительно уравнений второго

¹⁾ Названия зональная, тессеральная (мозаичная) и секториальная сферические функции идут от Максвелла; ср. заслуживающую прочтения гл. 9 его «Трактата».

порядка (следующие ниже утверждения легко распространяются на случай дифференциальных уравнений n -го порядка).

Особыми точками линейного дифференциального уравнения называют такие значения независимой переменной x , для которых один из коэффициентов, после того как все коэффициенты разделены на коэффициент при старшей производной от y , обращается в бесконечность. Все остальные точки называются *обыкновенными*.

В окрестности обыкновенной точки $x = x_0$ уравнение может быть проинтегрировано с помощью двух степенных рядов, которые начинаются с членов $(x - x_0)^0$ или $(x - x_0)^1$. Умножив эти ряды на произвольные постоянные и сложив их друг с другом, получим общий интеграл уравнения. Особые точки, со своей стороны, распадаются на две группы, судя по тому, возможно или нет в их окрестности разложение в степенной ряд, причём такие разложения, вообще говоря, могут и не начинаться с целых степеней. Особые точки первой группы называются *регулярными* особыми точками, второй группы — *иррегулярными*.

Чтобы найти степень α начального члена степенного ряда для регулярной особой точки $x = x_0$, полагают

$$y = z^\alpha (a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots) = \sum a_n z^{\alpha+n}, \quad z = x - x_0, \quad (3)$$

после чего α находится как корень некоторого квадратного уравнения, так называемого *характеристического уравнения*, которое получается, если подставить (3) в левую часть дифференциального уравнения и приравнять нулю коэффициент при низшей степени $z^{\alpha-2}$. Приравнивание нулю коэффициентов при следующих степенях приводит к рекуррентным формулам для a_n .

Для того чтобы описанная процедура привела к цели, необходимо, как это легко усматривается из вычисления, чтобы было выполнено следующее условие: коэффициенты при y'' , y' , y в рассматриваемом уравнении не должны обращаться в изучаемой точке в бесконечность быстрее, чем

$$1, \quad \frac{1}{z}, \quad \frac{1}{z^2} \quad (4)$$

соответственно. Таким образом, этот критерий является достаточным для того, чтобы было возможно разложение (3) или, что то же самое, чтобы особая точка была регулярной. Необходимость этого условия мы не будем здесь доказывать.

Если в такой особой точке оба корня характеристического уравнения отличаются на целое число, то в том частном решении, которое отвечает значению α с меньшей действительной частью, возникают особенности [в частности, логарифмические особенности, ср. дополнение 2, уравнение (7)]. Мы не будем вдаваться здесь в подробности, поскольку нас будут интересовать в первую очередь только непрерывные решения наших дифференциальных уравнений.

Часто оказывается удобным ввести вместо y другую переменную v по формуле

$$y = z^\alpha v, \quad v = \sum a_n z^n. \quad (5)$$

В случае уравнения (2) особыми точками являются точки $x = \pm 1$, но они обе, как это сейчас будет показано, относятся к числу регулярных особых точек. Чтобы исследовать, например, точку $x = 1$, мы положим $z = x - 1$. Тогда (2) перейдёт в

$$y'' + \frac{2z+1}{z(z+2)} y' - \left[\frac{\lambda}{z(z+2)} + \frac{m^2}{z^2(z+2)^2} \right] y = 0,$$

и, следовательно, критерий (4) выполняется. Далее, если мы воспользуемся разложением (3) и образуем коэффициент при $z^{\alpha-2}$, то получим:

$$\left[\alpha(\alpha-1) + \alpha - \frac{m^2}{4} \right] a_0 = 0,$$

и так как коэффициент a_0 можно считать отличным от нуля, то характеристическим уравнением будет

$$\alpha^2 - \frac{m^2}{4} = 0, \quad \alpha = \pm \frac{m}{2}. \quad (6)$$

Те же показатели получаются и в точке $x = -1$ после подстановки $z = x + 1$.

Для исследования точки $x = \infty$ общим приёмом является известная из теории функций подстановка $x = \frac{1}{t}$, которая в случае (2) приводит к

$$\ddot{y} + \frac{2t}{t^2-1} \dot{y} + \frac{1}{t^2(t^2-1)} \left(\lambda - \frac{m^2 t^2}{t^2-1} \right) y = 0$$

(точки означают дифференцирование по t). Применение критерия (4) снова показывает, что и $t = 0$ является регулярной особой точкой, причём характеристическое уравнение есть $\alpha(\alpha-1) - \lambda = 0$.

В силу требуемой непрерывности y в области $-1 \leq x \leq +1$ мы должны искать лишь ту ветвь функции, которой на обеих границах $x = \pm 1$ отвечает показатель $+\frac{m}{2}$ (считаем m положительным). Поэтому, следуя указанию (5), мы положим

$$y = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} v, \quad (7)$$

чем мы сразу выделим из y обе характеристические степени x^α , отвечающие расположенным на конечном расстоянии особенностям $\left(\alpha = \pm \frac{m}{2}, z = x \mp 1 \right)$.

Тогда (2) приводит к следующему дифференциальному уравнению для v :

$$(1-x^2)v'' - 2(m+1)xv' + (\lambda - m - m^2)v = 0, \quad (8)$$

которое можно проинтегрировать, положив

$$v = \sum a_\nu x^\nu. \quad (9)$$

Подставляя (9) в уравнение и приравнявая нулю коэффициенты при последовательных степенях x^ν , получаем следующие рекуррентные формулы для коэффициентов a_ν :

$$(\nu+2)(\nu+1)a_{\nu+2} = \{ \nu(\nu-1) + 2(m+1)\nu - \lambda + m + m^2 \} a_\nu. \quad (10)$$

Заметим прежде всего, что если мы положим $a_0 \neq 0$, а $a_1 = 0$, то наш ряд будет содержать только *чётные* степени, в противоположном случае $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$ останутся только *нечётные* степени x . Далее, если мы позаботимся так выбрать значение λ , что коэффициент при a_ν , скажем для $\nu = n$, обратится в нуль, то в силу рекуррентных формул обратятся в нуль и все коэффициенты a_{n+2}, a_{n+4}, \dots , и наш ряд (9) оборвётся на члене номера $\nu = n$. Таким образом λ мы определяем собственные значения шаровых функций. Именно полагая в (10) коэффициент в правой части равным нулю при $\nu = n$, получаем:

$$\lambda = n(n-1) + 2(m+1)n + m(m+1) = (m+n)(n+m+1).$$

Поскольку полином v оказывается полиномом n -й степени, степень присоединённых собственных функций y оказывается равной [ср. (7)] $n + m$; это число мы обозначим через l . Тогда для собственного значения получим просто

$$\lambda = l(l + 1). \quad (11)$$

Изложенный нами способ нахождения собственного значения и собственной функции применим во всех случаях, когда дифференциальное уравнение приводит к двучленной рекуррентной формуле. Мы увидим, что это выполняется во всех важнейших квантовых задачах, которые поддаются точному решению. Критерий двучленности рекуррентных формул будет приведён в дополнении 2.

Наш приём, основанный на обрыве степенного ряда, мы назовём *методом полиномов*.

Ясно, что он имеет характер достаточного, так как наш полином [даже и после умножения на отщеплённые ранее множители, ср. (7)] наверняка непрерывен в рассматриваемой области (здесь от $x = -1$ до $x = +1$) и, следовательно, является собственной функцией. Мы не можем остановиться здесь на доказательстве необходимости этого метода, т. е. того, что наше дифференциальное уравнение не имеет других собственных функций.

Обычным обозначением для y из (7) является $P_l^m(x)$. Так как n как степень полинома (9) является целым положительным числом и то же самое верно (со сделанными ранее оговорками) для m , то $l = n + m$ является целым числом, большим или равным m . Поэтому, если фиксировать l , то будут существовать $l + 1$ различных собственных функций P_l^m ; первая из них, для $m = 0$, является шаровой функцией l -го порядка в узком смысле и обозначается просто через P_l (зональная шаровая функция или полином Лежандра). Остальные P_l^m называются *присоединёнными* функциями того же порядка l . Последняя для $m = l$ (секториальная шаровая функция) пропорциональна в силу (7) выражению

$$(1 - x^2)^{\frac{m}{2}} = (\sin \vartheta)^m.$$

Если продифференцировать уравнение (8) по x , то получится дифференциальное уравнение относительно v' , которое будет отличаться от уравнения для v лишь тем, что на месте m будет стоять $(m + 1)$. Отсюда можно заключить, что в ряду функций $P_l, P_l^1, \dots, P_l^m, P_l^{m+1}$ полином v , относящийся к каждой последующей функции, можно получить из полинома, относящегося к предыдущей, путём дифференцирования. Таким образом, мы получаем выражение присоединённых шаровых функций через полиномы Лежандра:

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x). \quad (12)$$

Полиномы P_l также оказывается возможным представить с помощью формулы, которая содержит только последовательные дифференцирования, а именно:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (x^2 - 1)^l}{dx^l}. \quad (13)$$

Для доказательства этой формулы нам надо показать, что выражение (13) удовлетворяет уравнению (2), в котором положено $m = 0$ и [ср. (11)] $\lambda = l(l + 1)$, т. е. уравнению

$$(1 - x^2) y'' - 2x y' + l(l + 1) y = 0. \quad (14)$$

Проще всего исходить из фигурирующего в (13) полинома $2l$ -ой степени:

$$u = (x^2 - 1)^l.$$

Однократным дифференцированием получаем:

$$(x^2 - 1)u' = 2l x u,$$

а последующим $(l + 1)$ -кратным дифференцированием по формуле дифференцирования произведения получаем:

$$(x^2 - 1)u^{(l+2)} + 2(l + 1)xu^{(l+1)} + l(l + 1)u^{(l)} = 2l x u^{(l+1)} + 2l(l + 1)u^{(l)}.$$

Приводя здесь подобные члены и обозначая $u^{(l)} = u$, получаем в точности уравнение (14); тем самым доказано наше представление (13), которое отличается от $u^{(l)}$ только постоянным множителем. Этот множитель выбран нами таким образом, чтобы для $x = 1$ было бы

$$P_l(1) = 1. \tag{15}$$

Действительно, если записать в правой части (13)

$$(x^2 - 1)^l = (x - 1)^l(x + 1)^l,$$

то дифференцировать l раз надо будет только первый множитель, считая второй постоянным, так как все члены, возникающие при дифференцировании второго множителя, исчезнут при $x = 1$. Поэтому первый множитель даёт окончательно $l!$, а второй 2^l , которые сокращаются со знаменателем в (13). Нормировка (15) для шаровых функций является обычной со времени Лежандра. В силу (12), вместе с P_l оказываются определённым образом нормированными и P_l^m . Однако позже мы познакомимся с другой нормировкой, основанной на соотношениях ортогональности, справедливых для всех собственных функций.

Следует ещё отметить, что число сферических функций (собственных функций двумерной задачи в переменных ϑ и φ) равно не $l + 1$, но, в силу наличия двойного знака m в выражении $\Phi(\varphi) = e^{\pm im\varphi}$, $2l + 1$; именно, все эти функции представляются в виде

$$u_{lm} = P_l^m(\cos \vartheta) e^{\pm im\varphi}, \quad m \geq 0. \tag{16}$$

Ниже, в формулах (16а), (16б), мы освободимся от ограничения $m \geq 0$.

На рис. 1 и 2 мы приводим графики функций P_l для $l = 0, 1, 2, 3$, т. е. [ср. (12)] графики функций:

$$P_0 = 1; \quad P_1 = x; \quad P_2 = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}; \quad P_3 = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x,$$

равно как и присоединённых функций P_l^m для $l = 3$ и $m = 0, 1, 2, 3$, т. е. [ср. (12)] графики функций

$$P_3^0 = P_3 = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x; \quad P_3^1 = (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{3}{2}(5x^2 - 1); \quad P_3^2 = (1 - x^2)15x; \\ P_3^3 = (1 - x^2)^{\frac{3}{2}}15.$$

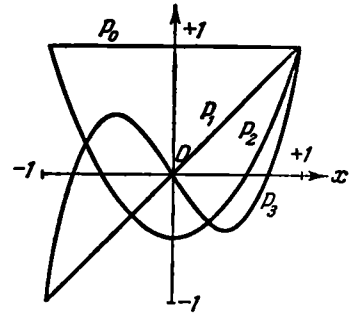


Рис. 1. Шаровые функции P_l (обыкновенные) для $l = 0, 1, 2, 3$, изображённые с соблюдением масштаба.

Применявшееся до сих пор определение P_l^m не является, однако, удобным в силу входящего в (16) двойного знака у m . Мы избаримся в дальнейшем от некоторых связанных с этим ненужных усложнений, если заметим (16) на

$$u_{lm} = P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad -l \leq m \leq +l, \quad (16a)$$

где мы допускаем, следовательно, и присоединённые функции с отрицательным верхним индексом. Это не приводит ни к каким трудностям, если несколько видоизменить определения (12) и (13), объединив их в формуле

$$P_l^m = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}}. \quad (16b)$$

Действительно, число дифференцирований $l+m$ оказывается здесь всегда большим нуля и для отрицательных $m \geq -l$; возникающая в первом множителе (16b) для отрицательных m бесконечность в точках $x = \pm 1$ является только кажущейся, ибо она устраняется вторым множителем, так что P_l^m из (16b), как и $P_l^{|m|}$, конечно для всех конечных значений аргумента. Далее, (16b) удовлетворяет дифференциальному уравнению (2) и для отрицательных значений m . Поэтому правая часть (16b) может отличаться при отрицательном m от $P_l^{|m|}$ только постоянным множителем:

$$P_l^m = C_{lm} P_l^{|m|}. \quad (16в)$$

Рис. 2. Присоединённые шаровые функции P_l^m для $l=3$, $m=0, 1, 2, 3$, умноженные на такие множители, что максимум каждой P_l^m становится равным единице, а именно:

$$P_3^0 \cdot 1, \quad P_3^1 \cdot \frac{\sqrt{15}}{8},$$

$$P_3^2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{10}, \quad P_3^3 \cdot \frac{1}{15}.$$

Для положительных значений m этот множитель, как легко видеть, равен единице. Его значение для отрицательного m легко найти, если сравнить друг с другом члены с наивысшей степенью x в правой и левой частях (16в). В силу (16b) в левой части получаем:

$$(-1)^{\frac{m}{2}} \frac{(2l)!}{(l-m)!} \frac{x^l}{2^l l!},$$

с другой стороны, в правой части (16в), опять в силу (16b), но с m , заменённым на $|m|$, возникает

$$C_{lm} (-1)^{\frac{|m|}{2}} \frac{(2l)!}{(l-|m|)!} \frac{x^l}{2^l l!}.$$

Сравнивая эти выражения, получаем:

$$C_{lm} = (-1)^{\frac{m-|m|}{2}} \frac{(l-|m|)!}{(l-m)!},$$

что, поскольку m должно быть отрицательным, можно записать как

$$C_{lm} = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (16г)$$

Нас особенно будет интересовать поведение P_l^m вблизи точки

$$x = 1, \quad z = 1 - x = \frac{\theta^2}{2} \rightarrow 0;$$

мы положим

$$\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial z}, \quad 1 + x = 2 - z \rightarrow 2.$$

Тогда вычисление (16б) при отрицательном m даёт

$$P_l^m = (2z)^{\frac{m}{2}} \frac{(-1)^m}{l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} z^l = (2z)^{\frac{m}{2}} \frac{(-1)^m}{|m|!} z^{-m} = \frac{(-1)^m}{|m|!} \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{|m|}{2}},$$

что мы можем записать также и в виде

$$P_l^m = \frac{(-1)^{|m|}}{2^{|m|} |m|!} \theta^{|m|}, \quad m < 0. \quad (16д)$$

Напротив, при положительном $m < l$ для $x \rightarrow 1$

$$P_l^m = \frac{1}{2^m m!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \theta^m, \quad m > 0 \quad (16е)$$

Наконец, мы можем записать соотношения (16в, г) так, чтобы они, как и (16б), были справедливы как для отрицательных, так и для положительных m , а именно в виде

$$P_l^{-m} = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m. \quad (16ж)$$

Более симметричное и потому значительно более удобное определение функций P_l^m приводит Дарвин¹⁾ в своих работах по эффекту Зеемана. Он добавляет в правую часть (16б) множитель $(l-m)!$, т. е. полагает

$$P_l^m = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{(l-m)!}{2^l l!} \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} \quad (17)$$

для $-l \leq m \leq +l$. Тогда в формуле (16ж) произведение $(l-m)! P_l^m$ объединяется в дарвиновскую P_l^m ; а $(l+m)! P_l^{-m}$ — в дарвиновскую P_l^{-m} . Следовательно, в нормировке Дарвина (16ж) упрощается:

$$P_l^{-m} = (-1)^m P_l^m, \quad (17а)$$

причём это соотношение пригодно и для положительных и для отрицательных m . Аналогичные упрощения возникают и в других соотношениях между шаровыми функциями (ср., например, формулу (9.16) гл. V и следующие). Однако при последовательном проведении дарвиновской нормировки изменяется и выражение для полиномов Лежандра, которое укоренилось и является общепринятым. Поэтому мы будем, вообще говоря, следовать определению (16б) и в соответствии с этим пользоваться (16ж) вместо (17а).

Б. Функции Бесселя. Вернёмся теперь к уравнению (1) и рассмотрим радиальную часть R введённого там решения. В силу (1а) дифферен-

1) С. G. Darwin, Proc. Roy. Soc. 115, 1 (1927), уравнение (3.2). Ещё одна, также отличающаяся от обычной нормировка используется, в силу практических потребностей геомагнитных вычислений, Шмидтом в его таблицах: A. Schmidt «Tafeln der normierten Kugelfunktionen», Gotha, 1935.

циальное уравнение для неё имеет вид:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2} \right) R = 0 \quad (18)$$

или, если мы заменим λ собственным значением (11) и введём новую переменную $kr = \rho$ (штрихи означают в дальнейшем производные по ρ):

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0, \quad \rho = kr. \quad (18a)$$

В силу смысла переменной r границами области изменения ρ являются точки $\rho = 0$ и $\rho = \infty$. Критерий (4) немедленно показывает, что $\rho = 0$ является регулярной особой точкой. Если положить

$$R = \rho^\alpha (a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \dots)$$

и, вычислив коэффициент при $\rho^{\alpha-2}$ в левой части (18a), положить его равным нулю, то это приводит к характеристическому уравнению

$$\alpha(\alpha - 1) + 2\alpha - l(l + 1) = 0$$

и, следовательно,

$$\alpha = l \quad \text{или} \quad \alpha = -l - 1. \quad (18b)$$

Для наших целей достаточно рассмотрения положительного корня $\alpha = l$. Поэтому разложение R вблизи точки нуль будет иметь вид:

$$R = \rho^l (a_0 + a_1 \rho + \dots). \quad (19)$$

Точка $\rho = \infty$ является, напротив, иррегулярной особой точкой. Мы исследуем асимптотическое поведение в этой точке с помощью метода, который хотя и является несколько смелым с математической точки зрения, но тем не менее будет приводить нас к цели и в других случаях. Для больших значений ρ (18) переходит в

$$R'' + R = 0$$

и может быть проинтегрировано, причём двумя частными решениями будут

$$R = Ae^{i\rho} \quad \text{или} \quad R = Be^{-i\rho}. \quad (20)$$

Мы можем сейчас же найти и второе приближение, если будем, например, считать коэффициент A «медленно меняющейся величиной». Под этим утверждением понимается, как и в § 1, что мы будем считать отличным от нуля только A' , в то время как A'' , $\frac{A'}{\rho}$, а также и $\frac{A}{\rho^2}$ будут положены равными нулю. После подстановки в (18a) и сокращения на общий множитель $e^{i\rho}$ получаем:

$$2iA' + \frac{2l}{\rho} A = 0, \quad A = \frac{\text{const}}{\rho}. \quad (21)$$

То же самое справедливо и для B . Таким образом, для очень больших и действительных ρ оба решения не только оказываются конечными, но даже и стремятся к нулю. Отсюда следует, что решение (19), которое должно переходить при $\rho = \infty$ в комбинацию частных решений (20), удовлетворяет условиям непрерывности, которые надлежит на него наложить не только в точке $\rho = 0$, но и в точке $\rho = \infty$; бесконечность не приносит с собой новых требований к R . Следовательно, входящий в уравнение (18) параметр k остаётся для неограниченной области неопределённым; напротив, если бы область была ограничена сферой радиуса $r = a$, на которой действует гра-

ичное условие, скажем $R = 0$, то k должно было бы удовлетворять трансцендентному уравнению и его значения образовали бы «дискретный спектр». В случае неограниченной области можно говорить о «непрерывном спектре».

Мы покажем теперь, что наши собственные функции (19) выражаются через функции Бесселя, а именно, что

$$R = \frac{C}{\sqrt{\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho). \quad (22)$$

В самом деле, если подставить это выражение в (18а), то после нетрудных выкладок для J получается уравнение

$$J'' + \frac{1}{\rho} J' + \left(1 - \frac{n^2}{\rho^2}\right) J = 0, \quad (23)$$

где в нашем случае

$$n = l + \frac{1}{2}. \quad (23a)$$

Уравнение (23) является известным уравнением для функции Бесселя порядка n . Его решением является сходящийся для любых значений ρ ряд:

$$J_n(\rho) = \frac{\left(\frac{\rho}{2}\right)^n}{\Gamma(n+1)} \left(1 - \frac{1}{1!} \frac{\left(\frac{\rho}{2}\right)^2}{n+1} + \frac{1}{2!} \frac{\left(\frac{\rho}{2}\right)^4}{(n+1)(n+2)} - \frac{1}{3!} \frac{\left(\frac{\rho}{2}\right)^6}{(n+1)(n+2)(n+3)} + \dots \right). \quad (24)$$

Кроме функций Бесселя J_n , нам потребуются в дальнейшем оба рода функций Ганкеля H_n^1 и H_n^2 . Они также являются решениями дифференциального уравнения (23) и выделяются тем, что обладают при $\rho \rightarrow \infty$ простым асимптотическим поведением (20). Именно, при $\rho \rightarrow \infty$ имеют место соотношения (надо помнить, что при переходе от R к J или к H^1 , H^2 был выделен множитель $\rho^{-\frac{1}{2}}$):

$$\left. \begin{aligned} H_n^1(\rho) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\rho}} e^{i\left[\rho - \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right]}, \\ H_n^2(\rho) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\rho}} e^{-i\left[\rho - \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right]}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Выбор постоянных множителей [соответствующих A и B в (20)] сделан таким образом, чтобы существующее линейное соотношение между H^1 , H^2 и J приняло бы простой вид:

$$J_n = \frac{1}{2} (H_n^1 + H_n^2). \quad (26)$$

В то время как J конечна в нуле, H^1 и H^2 там бесконечны.

§ 4. ПРОХОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛН ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ ПОРОГ. УСЛОВИЯ НЕПРЕРЫВНОСТИ, ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

Мы вернёмся к рассматривавшимся в § 2 плоским волнам и займёмся вопросом об их поведении при переходе через потенциальный порог.

Пусть, например:

$$\begin{aligned} \text{область I} & \quad x < 0, \quad V = 0; \\ \text{область II} & \quad x > 0, \quad V = \text{const} \neq 0. \end{aligned}$$

Пусть падающая волна распространяется в положительном направлении оси x , так что мы будем иметь дело с одномерной задачей; пусть кроме того, волна монохроматическая и её зависимость от времени задается, как и в (2.22), выражением

$$e^{-i\omega t} = e^{-\frac{iW}{\hbar} t}.$$

В области I в силу (1.11) имеет место уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} W, \quad \Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dx^2}. \quad (I)$$

Его решение мы запишем в виде

$$\psi = e^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (Ia)$$

Мы добавляем, следовательно, к падающей волне, амплитуда которой нормирована на единицу, волну, отражённую при $x = 0$, амплитуду которой B мы хотим найти.

В области II уравнение Шредингера будет гласить

$$\Delta\psi + k'^2\psi = 0, \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (W - V). \quad (II)$$

Так как справа на бесконечности должна существовать только уходящая, но не падающая волна, то в качестве решения нам подходит только одночленное выражение

$$\psi = Ce^{ik'x}, \quad (IIa)$$

где k' действительно или мнимо, судя по тому,

$$V < W \text{ или } V > W. \quad (III)$$

В обоих случаях, для того чтобы (IIa) имело смысл, квадратный корень при вычислении k' надо брать с положительным знаком (положительным и действительным для $V < W$, чисто мнимым и расположенным на положительной мнимой оси для $V > W$). С классической корпускулярной точки зрения $V > W$ означает естественно, что кинетической энергии W электрона не хватает для того, чтобы преодолеть потенциальный порог V .

Мы интересуемся теми условиями непрерывности, которые связывают φ_I и φ_{II} . Для этой цели представим себе, что вместо отвесного у нас имеется наклонный потенциальный порог, например такой, который изображён на рис. 3 пунктиром, и потребуем аналогично тому, как это делается при выводе граничных условий в электродинамике, чтобы волновое уравнение выполнялось и в переходной области (непрерывно меняющееся k'). Тогда, в силу (II), для области $-h < x < +h$ имеет место

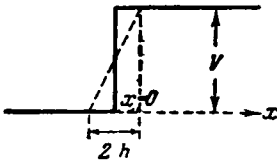


Рис. 3.

$$\int_{-h}^{+h} \Delta\psi dx = \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{+h} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-h} = -\sqrt{2k'^2\psi}h,$$

где черта сверху означает усреднение в интервале $2h$. Тем самым в пределе при $h \rightarrow 0$ получаем:

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_I = \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{II}. \quad (IV)$$

и, кроме того,

$$\psi_I = \psi_{II}. \quad (IVa)$$

Эти условия справедливы, конечно, не только в одномерном, но и в трёхмерном случае с произвольно расположенными граничными поверхностями, для чего их надо переписать в виде

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_I = \left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{II}, \quad \psi_I = \psi_{II}. \quad (IVб)$$

Применяя (IVa) и (IV) к (Ia) и (IIa), получаем в точке разрыва $x = 0$:

$$1 + B = C, \quad 1 - B = \frac{k'}{k} C, \quad (V)$$

следовательно,

$$B = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad C = \frac{2k}{k + k'}. \quad (Va)$$

Перейдём теперь от B и C к коэффициенту отражения R , который мы определим, объединяя оба рассмотренных в (III) случая, соотношением

$$R = |B|^2 = \left|\frac{k - k'}{k + k'}\right|^2, \quad (VI)$$

причём в случаях $V < W$ (k' действительно) и $V > W$ (k' чисто мнимо) мы, соответственно, получим:

$$0 < R < 1 \quad \text{и} \quad R = 1.$$

Полученный в первом случае результат является знаменательным: с корпускулярной точки зрения электрон, который может преодолеть порог, никогда не мог бы отразиться, но всегда должен был продолжать своё движение с уменьшенной скоростью. Напротив, результат, получающийся во втором случае, естественен и с корпускулярной точки зрения: $R = 1$ означает «полное внутреннее отражение» электронов, которые в силу недостаточной кинетической энергии W не в силах преодолеть потенциальный порог.

Однако, с другой стороны, во втором случае с корпускулярной точки зрения непонятно, как может существовать в случае полного отражения во второй среде состояние ψ , связанное с конечным значением C на поверхности и экспоненциально убывающее с глубиной. Но с точки зрения волновой теории это поведение представляется нам, конечно, совершенно естественным. Действительно, и в обычной оптике при полном внутреннем отражении в оптически менее плотной среде существует экспоненциально затухающее с глубиной волновое движение. Кажущееся противоречие с законом сохранения энергии или с законом сохранения числа частиц разрешается здесь, как и в оптике, если вместо неограниченно протяжённой плоской волны рассмотреть пространственно ограниченную и учесть диффракционные явления на краях волны, которые приводят в оптическом случае к тому, что энергия входит во вторую среду и распространяется далее в ней параллельно поверхности раздела.

Если мы хотим, как и в оптике, определить, кроме коэффициента отражения R , также и прозрачность D , то в случае $V < W$ она задаётся выражением

$$D = \frac{k'}{k} C^2 = \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \quad (VII)$$

В случае же $V > W$, конечно,

$$D = 0, \quad (VIIa)$$

так как частицы не могут уйти в бесконечность в положительном направлении (ψ обращается при этом в нуль). Так как мы нормировали падающую волну на единицу, то

$$R + D = 1. \quad (\text{VIII})$$

Мы хотим, несколько забегаая вперёд, следующим образом объяснить возникновение множителя $\frac{k'}{k}$ в (VI): C^2 имеет смысл плотности частиц в области II; нам же нужна не плотность частиц, а поток частиц по отношению к потоку в области I, который мы положили равным единице. Поэтому мы должны помножить C^2 на отношение скоростей $\frac{v'}{v}$ во второй и первой областях, которое, в силу формулы де Бройля, совпадает с отношением $\frac{k'}{k}$. Подробнее мы коснёмся этого вопроса в § 7, уравнение (76).

Если мы рассмотрим проходящую волну, которая падает на границу I, II наклонно, то её направление распространения будет в случае $0 < V < W$ отдаляться от нормали. Это обусловлено тем, что фазовая скорость в II в силу (2.11) больше, чем фазовая скорость в I:

$$a_{II} = \frac{\omega}{k'} > \frac{\omega}{k} = a_I,$$

и следует также из применимых в этом случае общих граничных условий (IV6). Если же речь идёт не о потенциальном пороге, но о потенциальном обрыве, $V < 0$, то направление распространения волны будет приближаться к нормали, так как тогда $k'^2 = \frac{2m}{\hbar}(W + |V|) > k^2$.

Из граничных условий (IV6) немедленно следует известный вид закона преломления при переходе из среды I в среду II:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = n \begin{cases} \alpha — \text{угол падения,} \\ \beta — \text{угол преломления,} \end{cases}$$

где показатель преломления определяется следующим образом:

$$n = \frac{a_I}{a_{II}} = \frac{k'}{k} = \frac{\lambda}{\lambda'} = \sqrt{\frac{W - V}{W}}. \quad (\text{IX})$$

Отсюда следует:

$$\left. \begin{array}{l} n < 1 \text{ для } V > 0, \text{ потенциальный порог} \\ n > 1 \text{ для } V < 0, \text{ потенциальный обрыв.} \end{array} \right\} \quad (\text{IXa})$$

Мы вернёмся теперь к нормальному падению, но будем рассматривать не порог, а изображённый на рис. 4 потенциальный барьер. Мы должны будем тогда различать три области:

$$\begin{array}{lll} \text{I. } x < 0, & \psi = e^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{по (I),} \\ \text{II. } 0 < x < b, & \psi = B'e^{ik'x} + C'e^{-ik'x} & \text{по (II),} \\ \text{III. } b < x, & \psi = Ce^{ikx} & \text{по (I),} \end{array}$$

причём в третьей области учитывается, что справа не должно падать волны.

Мы будем интересоваться только случаем $V > W$, в котором с классической корпускулярной точки зрения барьер был бы непроницаем для падающего электрона, в то время как в волновой механике барьер оказы-

вается обладающим, вообще говоря, не равной нулю прозрачностью. Именно, исключая из 2 · 2 граничных условий (IV) и (IVa) на обеих поверхностях раздела при $x = 0$ и $x = b$ постоянные B , B' и C' , находим после несложного вычисления, что

$$C = \frac{4kk'e^{-ikb}}{(k+k')^2 e^{-ik'b} - (k-k')^2 e^{+ik'b}}. \quad (1)$$

Иными словами, оказывается, что в области III существует отличная от нуля и не зависящая от x амплитуда волнового движения; это движение ни в какой мере не является затухающим, но носит характер обычной распространяющейся вправо волны e^{ikx} . (Опять в согласии с известными явлениями в оптике: если I и III — стекло, II — воздух, то претерпевающая полное внутреннее отражение, следовательно, достаточно наклонно падающая волна продолжается с соответственно уменьшенной амплитудой и после $x = b$, если только b достаточно мало, точнее, сравнимо с длиной световой волны.)

Заметим, что в (1) значение k' , в силу $V > W$, оказывается чисто мнимым, и, следовательно, показатели $\pm ik'b$ в числителе — действительными. Для прозрачности барьера D , которую здесь надо определить, в силу равенства скоростей в областях I и III, как $D = |C|^2$, легко находим из (1)

$$D = \frac{4k^2 |k'|^2}{(k^2 + |k'|^2)^2 \operatorname{sh}^2(|k'|b) + 4k^2 |k'|^2}. \quad (2)$$

Таким образом, мы действительно получаем, вообще говоря, конечную прозрачность барьера, т. е. конечную вероятность того, что электрон сможет пройти через барьер. И при этом он не перепрыгивает через барьер, а именно проходит сквозь него, как это видно из рис. 4, где мы отметили горизонтальной стрелкой, что электрон сохраняет свою энергию W , которую он имел в области I и в области II, и приносит её с собой в область III. В правой половине рис. 4 изображена зависимость прозрачности барьера D от энергии частицы W : при $W = V$ и $k' = 0$ прозрачность D велика, но быстро уменьшается, обращаясь в нуль при $W = 0$ и $k = 0$. При больших энергиях электрон с лёгкостью проходит через барьер; по мере уменьшения энергии прохождение барьера становится затруднительным.

Положение вещей хорошо передаётся часто употребляемым термином «*туннельный эффект*»: путь электрона идёт не *через* потенциальный горб, но *сквозь* него по линии постоянной энергии. Этот туннельный эффект играет основную роль для многочисленных химических реакций, которые с классической точки зрения не могли бы идти из-за препятствующего сближению молекул потенциального барьера, а с точки зрения волновой механики становятся возможными благодаря рассматриваемому нами эффекту; тот же эффект весьма существен и для некоторых вопросов электронной теории металлов (переходное сопротивление, эффект холодной эмиссии электронов под действием внешнего поля). Однако прежде всего на этом пути впервые было найдено объяснение радиоактивного распада и превращения атомов (теория α -распада Гамова).

Чтобы подготовиться к дальнейшему изложению (гл. IV, § 11), вернёмся ещё раз к изображённой на рис. 3 потенциальной ступеньке; однако теперь будем исходить из аналитического выражения для потенциала, которое было

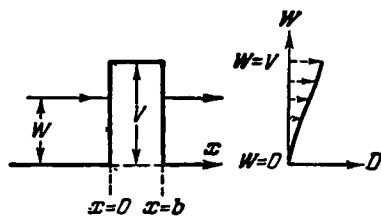


Рис. 4.

введено Экартом и распространено Заутером ¹⁾ на соответствующую релятивистскую задачу, а именно из потенциала:

$$V = \frac{U}{1 + e^{-ax}}; \quad V = \begin{cases} 0 & x = -\infty, \\ U & x = +\infty, \\ \frac{U}{2} & x = 0, \end{cases} \quad (3)$$

где U — высота ступеньки, а a измеряет крутизну подъема потенциала. Мы можем воспользоваться теперь преимуществами одной области и единого волнового уравнения:

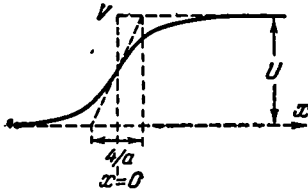


Рис. 5.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{U}{1 + e^{-ax}} \right) \psi = 0. \quad (4)$$

Для того чтобы привести это уравнение к известному виду, введём новую независимую переменную

$$y = -e^{-ax} \quad (5)$$

и новую функцию

$$\psi = y^\mu F, \quad (6)$$

где μ — параметр, которым можно будет распорядиться. Тогда после несложного вычисления получим для F дифференциальное уравнение

$$y^3(1-y) \frac{d^2F}{dy^2} + (2\mu+1)y(1-y) \frac{dF}{dy} + \left\{ \mu^3(1-y) + \frac{2m}{a^2\hbar^2} [W(1-y) - U] \right\} F = 0. \quad (7)$$

Левая часть будет делиться на y , если выбрать

$$\mu^3 = -\frac{2m}{a^2\hbar^2} (W - U). \quad (8)$$

Если положить ещё

$$\nu^3 = -\frac{2m}{a^2\hbar^2} W, \quad (8a)$$

то вместо (7) получим:

$$y(1-y) \frac{d^2F}{dy^2} + (2\mu+1)(1-y) \frac{dF}{dy} - (\mu^3 - \nu^3) F = 0, \quad (9)$$

что удобнее записать в виде

$$y(1-y) \frac{d^2F}{dy^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)y] \frac{dF}{dy} - \alpha\beta F = 0, \quad (10)$$

где мы ввели сокращения

$$\alpha = \mu + \nu, \quad \beta = \mu - \nu, \quad \gamma = 2\mu + 1. \quad (11)$$

Уравнение (10) является уравнением для гипергеометрической функции,

¹⁾ С. Eckart, Phys. Rev. 35, 1303 (1930), F. Sauter, Zs. f. Phys. 73, 547 (1931). К приведённым здесь работам следует добавить ещё работу P. S. Epstein, Proc. Nat. Ac. (Washington) 16, 627 (1930), где наиболее общим образом исследуется та форма потенциального порога, или потенциального барьера, которая допускает интегрирование волнового уравнения в гипергеометрических функциях. Относительно применений к отражению радиоволн в ионосфере, в частности представления коэффициента отражения через Γ -функции в аналогии с нашим уравнением (1.4.17) и уравнениями (24), (24a) дополнения 16, см. также K. Rawer, Hochfrequenztechnik 53, 150 (1939).

которая много изучалась со времени Гаусса. Мы рассмотрим её более подробно в следующей главе [см. (2.18)], а здесь ограничимся установлением того обстоятельства, что прохождение электронной волны через ступеньку подходящим образом выбранной формы (3) может быть представлено гипергеометрической функцией F во всей области изменения переменного $-\infty < x < +\infty$, т. е. по (5) в области $-\infty < y < 0$.

Входящие в F параметры α , β и γ зависят от постоянных μ и ν , знак которых, в силу (8) и (8а), не определён.

Однако сразу ясно, что μ надо выбрать мнимым отрицательным. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим предельный случай $x \rightarrow \infty$, т. е. по (5), $y \rightarrow 0$. Так как F в обычно употребляемой нормировке Гаусса равно единице при $y = 0$, то мы получаем из (5) и (6):

$$\psi = (-1)^\mu e^{-\mu a x}. \quad (12)$$

Но при $x \rightarrow \infty$ ψ должна быть уходящей волной. Поэтому мы должны выбрать знак корня в (8) следующим образом:

$$\mu = -\frac{i}{a} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (W - U)} = -\frac{i}{a} k' \text{ [ср. (II)].} \quad (13)$$

Тогда (12) действительно оказывается тождественным выражению

$$\psi = (-1)^\mu e^{+ik'x}. \quad (14)$$

Далее, в силу дифференциального уравнения (10), F симметрично по обоим параметрам α и β . Так как в силу (11) эти параметры имеют значения $\mu \pm \nu$, то знак ν не играет роли. Мы можем поэтому положить, например,

$$\nu = +\frac{i}{a} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} W} = +\frac{i}{a} k \text{ [ср.(I)].} \quad (15)$$

Следовательно, наше решение определено однозначно с точностью до произвольного общего множителя.

Нас интересует также и поведение при больших отрицательных x (падающая и отражённая волны), поэтому нам надо рассмотреть предельное поведение F при $y \rightarrow -\infty$. Мы можем получить его из дополнения 16. В силу уравнения (19) этого дополнения при нашем смысле y , α , β и γ будет:

$$F = C_1 e^{\alpha(\mu+\nu)x} + C_2 e^{\alpha(\mu-\nu)x},$$

откуда, в силу (6) и (15):

$$\psi = (-1)^\mu (C_1 e^{a\nu x} + C_2 e^{-a\nu x}) = (-1)^\mu (C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}). \quad (16)$$

Таким образом, здесь происходит естественное разделение на падающую и отражённую волны. Для значений коэффициента отражения и прозрачности из (16) и (14) находим [ср. с определением D в (VII)]:

$$R = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2, \quad D = \frac{k'}{k} \left| \frac{1}{C_1} \right|^2, \quad \text{или } D = 0, \quad (17)$$

причём последнее значение имеет место, как и в случае (VIIа), для мнимого k' .

Последние вычисления будут продолжены в гл. IV, § 11 релятивистским образом. Пока же мы должны были ограничиться общим изложением проникновения электронной волны через потенциальную стенку и характеристикой основных черт, различающих корпускулярный и волномеханический подход к этому явлению.

§ 5. ОСЦИЛЛЯТОР И РОТАТОР, ИХ СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПО ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ

Простейшими примерами применения правил квантования являются осциллятор и ротатор (ср. т. I, гл. II, § 3). Мы рассмотрим теперь их с точки зрения волновой механики, заменяя прежние квантовые условия требованием непрерывности встречающихся собственных функций.

А. Линейный гармонический осциллятор обладает при отклонении от x положения равновесия потенциальной энергией

$$V = \frac{k}{2} x^2 = \frac{m}{2} \omega_0^2 x^2, \quad (1)$$

где $\omega_0 = 2\pi\nu_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ — круговая частота собственных колебаний (в смысле классической механики). В силу (1.11) волновым уравнением для осциллятора будет

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - \alpha^2 x^2)\psi = 0; \quad (2)$$

где использованы сокращённые обозначения

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} W, \quad \alpha = \frac{m\omega_0}{\hbar}. \quad (2a)$$

Область изменения независимого переменного x простирается от $x = -\infty$ до $x = +\infty$, причём эти граничные точки являются иррегулярными особыми точками. Мы убедимся в этом, исследуя асимптотическое поведение ψ для больших x . В этом случае во втором члене можно пренебречь λ по сравнению с $\alpha^2 x^2$ и (2) перейдёт в

$$\psi'' = \alpha^2 x^2 \psi. \quad (3)$$

Асимптотический интеграл этого уравнения [ср. аналогичные рассуждения при исследовании (3.20)] будет иметь вид

$$\psi = e^{\pm \frac{\alpha}{2} x^2}. \quad (4)$$

Действительно, если пренебречь членами с меньшими степенями x , то из (4) следует

$$\psi'' = \alpha^2 x^2 \psi,$$

как этого и требует соотношение (3). Из двух знаков в (4) можно использовать только нижний, ибо ψ должна остаться конечной для $x = \pm\infty$. Поэтому мы аналогично (3.7) положим

$$\psi = e^{-\frac{\alpha}{2} x^2} v \quad (5)$$

и определим v из дифференциального уравнения (2). Из (5), полагая для краткости $F = e^{-\frac{\alpha}{2} x^2}$, получаем:

$$\psi' = F(v' - \alpha x v),$$

$$\psi'' = F(v'' - 2\alpha x v' - \alpha v + \alpha^2 x^2 v),$$

и, следовательно, из (2) получится (член с x^2 сокращается):

$$v'' - 2\alpha x v' + (\lambda - \alpha)v = 0. \quad (6)$$

Разделим это уравнение на α и используем в качестве независимого переменного безразмерную величину

$$\xi = \sqrt{\alpha} x. \quad (7)$$

Дифференцирования по ξ обозначим в дальнейшем точками. Тогда (6) примет вид:

$$\ddot{v} - 2\xi\dot{v} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)v = 0. \quad (8)$$

Это уравнение будем интегрировать степенным рядом

$$v = \sum a_\nu \xi^\nu \quad (8a)$$

и получим из (8), приравнявая коэффициенты при ξ^ν нулю, двучленную рекуррентную формулу:

$$(\nu + 2)(\nu + 1)a_{\nu+2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1 - 2\nu\right)a_\nu = 0. \quad (8b)$$

Оборвем степенной ряд на члене с $\nu = n$. Для этого необходимо обратить в нуль коэффициент при a_n в рекуррентной формуле, после чего исчезнут и все следующие коэффициенты a_{n+2} , a_{n+4} , ... Таким образом,

$$\frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1 \quad (9)$$

или, согласно (2a),

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu_0. \quad (10)$$

С другой стороны, ранее с помощью квантового условия $\int p dq = nh$ для n -го энергетического уровня осциллятора получалось $W_n = n \hbar \nu_0$. Характерная разница состоит, следовательно, в появлении полуцелых чисел вместо целых.

В следующей главе мы вернёмся к значению, которое имеет этот результат в теории полосатых спектров.

Полиномы (8a), к которым мы таким образом пришли, носят название *полиномов Эрмита*. Мы будем использовать для n -го полинома обозначение $v = H_n$. Отвлекаясь от нормировочного множителя, их можно определить рекуррентными формулами (8b) или дифференциальным уравнением (8).

Используя содержащееся в (9) определение значения $\frac{\lambda}{\alpha}$, можно переписать это дифференциальное уравнение в виде:

$$\ddot{H} - 2\xi\dot{H} + 2nH = 0, \quad (11)$$

а рекуррентная формула запишется так: $(\nu + 2)(\nu + 1)a_{\nu+2} = -2(n - \nu)a_\nu$. Путём итераций получаем из неё:

а) n чётное, ν чётное и $< n$:

$$a_\nu = (-2)^{\frac{\nu}{2}} \frac{n(n-2)\dots(n-\nu+2)}{\nu!} a_0;$$

б) n нечётное, ν нечётное и $< n$:

$$a_\nu = (-2)^{\frac{\nu-1}{2}} \frac{(n-1)(n-3)\dots(n-\nu+2)}{\nu!} a_1.$$

В частности, при $\nu = n$ получается:

а) n чётное:

$$a_n = (-1)^{\frac{n}{2}} 2^n \frac{\left(\frac{n}{2}\right)!}{n!} a_0;$$

б) n нечётное:

$$a_n = (-1)^{\frac{n-1}{2}} 2^{n-1} \frac{\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{n!} a_1.$$

По укоренившемуся соглашению эти полиномы нормируют так, что

$$a_n = 2^n. \quad (12)$$

Тогда из приведённых соотношений следует

$$а) a_0 = (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)!}; \quad б) a_1 = 2(-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n-1}{2}\right)!}.$$

Общее представление для H_n (как для чётного, так и для нечётного n) следующее:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots \quad (13)$$

Для первых полиномов Эрмита мы получаем из него:

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= 1, & H_1 &= 2\xi, & H_2 &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi, & H_4 &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \end{aligned} \right\} \quad (13a)$$

Для многих целей полезно представление H_n через последовательные дифференцирования, аналогичное использованному нами для шаровых функций. Это представление записывается так:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (14)$$

Надо показать теперь, что так определённые H_n действительно удовлетворяют дифференциальному уравнению (11). Мы поступим при этом аналогично случаю шаровых функций. Положим

$$u = e^{-\xi^2} \quad (15)$$

и образуем

$$\frac{du}{d\xi} = \dot{u} = -2\xi u.$$

Последовательным дифференцированием по формуле многократного дифференцирования произведения получим отсюда

$$u^{(n+2)} = -2\xi u^{(n+1)} - 2(n+1)u^{(n)}. \quad (16)$$

Но, в силу (14):

$$(-1)^n u^{(n)} = e^{-\xi^2} H_n,$$

и, следовательно,

$$(-1)^n u^{(n+1)} = e^{-\xi^2} (\dot{H}_n - 2\xi H_n),$$

$$(-1)^n u^{(n+2)} = e^{-\xi^2} (\ddot{H}_n - 4\xi \dot{H}_n + (4\xi^2 - 2)H_n).$$

Если мы подставим эти выражения в (16), то действительно получится уравнение (11). Выражение (14) нормировано согласно условию (12). Это следует непосредственно из того, что старший коэффициент a_n получающегося из (14) полинома можно получить также последовательным дифференцированием $e^{-\xi^2}$.

Наконец, с помощью уравнений (5) и (7) мы можем перейти от полиномов H_n к соответствующим собственным функциям ψ_n . Именно:

$$\psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) = (-1)^n e^{+\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}}{d\xi^n}. \quad (17)$$

Собственные функции ψ_n подобно H_n будут чётными или нечётными функциями ξ , судя по тому, чётно или нечётно n . Ход функции ψ_0 совпадает с кривой распределения ошибок, поскольку $H_0 = 1$. На рис. 6 приведены графики ¹⁾ пяти первых собственных функций. То, что ψ_n действительно удовлетворяют требованию непрерывности в области

$$-\infty \leq \xi \leq +\infty,$$

гарантируется их представлением (17).

Б. Ротатор в пространстве. Представим себе, как и в т. I, гл. II, § 3 материальную точку массы m , которая может двигаться на заданном расстоянии a от закреплённого центра, с той разницей, что теперь мы хотим рассматривать не плоское вращение по кругу, а движение по поверхности шара, т. е. движение с двумя степенями свободы. К плоскому ротатору мы вернёмся в пункте В. В обоих случаях речь идёт о волномеханической задаче с дополнительным условием (здесь $r = a$). Общий метод рассмотрения подобного рода задач исследуется в дополнении 10. Следующий путь является самым простым, но, как это показано в дополнении 10, ни в коей мере не само собой разумеющимся.

Используем полярные координаты r, ϑ, φ и освободимся от фиксируемой дополнительным условием координаты r , положив

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= 0, \\ r &= a. \end{aligned}$$

Потенциальная энергия при постоянном r постоянна, и мы можем положить её равной нулю. Выражение $\Delta\psi$, которое заменяет в волновом уравнении кинетическую энергию, примет в наших координатах r, ϑ, φ после учёта условий $\frac{\partial}{\partial r} = 0$ и $r = a$ вид:

$$\Delta\psi = \frac{1}{a^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{a^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}.$$

Отсюда получим, введя $J = ma^2$ (момент инерции точки массы m относительно неподвижного центра), для волнового уравнения:

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2JW}{h^2} \psi = 0. \quad (18)$$

Это есть дифференциальное уравнение сферических функций, которое было проинтегрировано в § 3 посредством подстановки $\psi = \Theta\Phi$. Обозначенное там

¹⁾ Взяты из работы E. Schrödinger, Naturwiss. 14, 664 (1926).

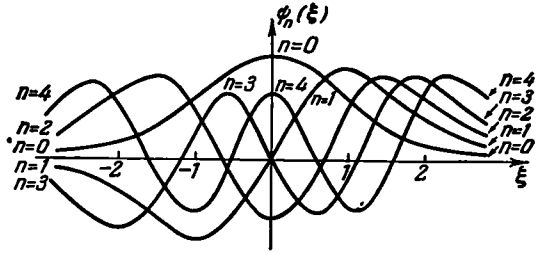


Рис. 6. Первые пять собственных функций

$$\text{осциллятора: } \psi_n = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}} \sqrt{n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

Относительно избранной здесь нормировки ψ см. § 3 этой главы.

через λ собственное значение заменяется здесь на

$$\lambda = \frac{2W}{\hbar^2}.$$

Тем самым из уравнения (3.11) следует, если мы заменим l на используемое в теории полосатых спектров j ,

$$\frac{2W}{\hbar^2} = j(j+1), \quad W_j = \frac{\hbar^2}{2J} j(j+1). \quad (19)$$

Сравним этот результат с рассмотрением, проведённым в т. I, гл. II, § 3. Из приведённых там формул (16), (17) и (18) для кинетической энергии n -го квантового состояния следовало

$$W_n = \frac{\hbar^2}{2J} n^2, \quad (19a)$$

где n — целое, а J также равно ma^2 . С другой стороны, мы можем переписать (19) в виде:

$$W_j = \frac{\hbar^2}{2J} \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right]. \quad (19b)$$

Если отвлечься здесь от последнего постоянного члена в скобке, который только сдвигает нулевой уровень энергии, то (19a) перейдёт в (19b), если заменить в первом из них n на $j + \frac{1}{2}$. Следовательно, в случае ротатора, как и в случае осциллятора, разница между волновой механикой и старой квантовой теорией состоит в том, что на место целых квантовых чисел выступают полуцелые.

В силу (3.16) каждому собственному значению (19) соответствует собственная функция:

$$\psi_{j,m} = P_j^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad -j \leq m \leq +j. \quad (20)$$

В отличие от W она зависит не только от j , но ещё и от m . Мы получаем, следовательно, не одну собственную функцию, но, в силу $|m| \leq j$, $2j+1$ различных. Собственное значение (19) оказывается не однократным, но $(2j+1)$ -кратным. В таком случае говорят о вырожденной проблеме собственных значений.

Понятие вырождения было введено первоначально Шварцшильдом (ср. т. I, гл. II, § 7) в применении к электронным орбитам и их представлению через угловые переменные. В волновой механике вместо различных типов орбит выступают различные собственные функции. Поэтому здесь степень вырождения можно определить числом собственных функций, относящихся к одному собственному значению, таким образом, чтобы отсутствие вырождения соответствовало наличию единственной собственной функции, однократное вырождение — наличию двух собственных функций и т. д. В случае ротатора в пространстве мы имеем дело с $2j$ -кратным вырождением¹⁾.

В. Ротатор в плоскости, осциллятор в плоскости и пространстве. К плоскому ротатору (материальная точка, движущаяся по кругу) мы придём, если положим в выражении для $\Delta\psi$ не только $\frac{\partial}{\partial r} = 0$,

¹⁾ Предлагаемая автором терминология не имеет распространения в нашей литературе. Напротив, в нашей литературе сейчас принято называть степень вырождения просто числом относящихся к одному собственному значению собственных функций, примиряясь с тем, что однократное вырождение совпадает с отсутствием вырождения. (Прим. пер.)

$r = a$, как это было сделано в пункте Б, но ещё и $\frac{\partial}{\partial \theta} = 0$, $\theta = \frac{\pi}{2}$, т. е. сохраняя зависимость только от третьей координаты φ . Тогда уравнение (18) переходит в

$$\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + \lambda\psi = 0, \quad \lambda = \frac{2JW}{\hbar^2}. \quad (21)$$

Его решением будет

$$\psi = e^{\pm in\varphi}, \quad n^2 = \lambda, \quad (22)$$

где n должно быть целым для того, чтобы решение было однозначной функцией φ . Итак, из (22) и (21) следует

$$W_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2J}, \quad (22a)$$

что в точности совпадает с (19a), т. е. с формулой старой квантовой теории ротатора. Таким образом, плоский ротатор квантуется и, согласно волновой механике, целыми, а не полуцелыми числами.

Однако как по теоретическому смыслу волновой механики, так и с точки зрения явлений, наблюдаемых в полосатых спектрах, не остаётся никакого сомнения в том, что пространственное рассмотрение задачи о ротаторе является точным, в то время как плоское — недопустимым. Тем самым возникает вопрос, не нуждается ли в поправках и проведённое выше рассмотрение осциллятора как линейного образования и не приведёт ли рассмотрение пространственного или плоского осциллятора к иным собственным значениям. Чтобы выяснить это обстоятельство, заменим (2) на

$$\Delta\psi + (\lambda - \alpha^2 \sum x_i^2)\psi = 0, \quad (23)$$

где λ и α имеют то же значение, что и в (3), а $\Delta\psi$ означает обычное дифференциальное выражение, записанное с помощью прямоугольных координат x_1, x_2, x_3 или x_1, x_2 . Но уравнение (23) можно сразу же «расщепить» аналогично тому, как это было в соответствующей задаче старой квантовой теории (ср. т. I, гл. II, § 6). Действительно, если мы запишем $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ или $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$, то получим для каждой координаты своё дифференциальное уравнение вида (2) с λ_i вместо λ и x_i вместо x ; для λ_i будет опять иметь место условие (9) с заменой n на n_i . В силу (9) для суммы всех λ_i получаем:

$$\lambda = \sum \lambda_i = \alpha^2 \sum (2n_i + 1),$$

где n_i — целые числа, и поэтому для полной энергии осциллятора, используя (10), находим:

$$W = \sum W_i = \sum \left(n_i + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu_0.$$

Для плоского осциллятора ($i = 1, 2$) $\sum \left(n_i + \frac{1}{2}\right)$ будет всегда целым числом, а для пространственного ($i = 1, 2, 3$) — полуцелым. Тем самым выясняется аналогично случаю ротатора поразительное обстоятельство: в зависимости от числа измерений осциллятор надо квантовать либо полуцелыми, либо целыми числами. То же обстоятельство встретится нам и при рассмотрении задачи Кеплера.

Используя (17), мы можем немедленно получить выражения для собственных функций плоского или пространственного осциллятора:

$$\psi_n = \Pi e^{-\frac{\alpha}{2} \sum x_i^2} H_{n_i}(\sqrt{\alpha} x_i), \quad n = \sum n_i.$$

Таким образом, собственные значения оказываются вырожденными: каждому данному n соответствуют столько различных собственных функций, сколькими различными способами можно аддитивно построить n из целых положительных чисел n_i . Вырождение снимется, если мы перейдем к анизотропному осциллятору, т. е. если мы примем, что собственные частоты ω_0 , а следовательно, и α [см. (3)], не одинаковы для различных пространственных направлений. Однако возможность разделения переменных и весь ход решения сохраняются и в этом случае.

Возникает естественный вопрос: какое число измерений надо приписать действительному осциллятору. Пока речь идёт о колебаниях двухатомных молекул по соединяющей оба атома линии, ответ гласит: одно измерение. Мы вернёмся ещё к этому вопросу в следующей главе. В случае же многоатомных молекул движение разбивается на нормальные колебания системы, каждое из которых эквивалентно опять линейному осциллятору.

§ 6. ОБОБЩЕНИЕ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ. УРАВНЕНИЕ, ЗАВИСЯЩЕЕ ОТ ВРЕМЕНИ. СЛУЧАЙ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Мы теперь должны расширить фундамент, на котором были основаны наши предыдущие рассуждения. Мы ограничивались до сих пор случаем одной частицы и таких сил, которые допускают введение не зависящего от времени потенциала (§ 1). Мы освободимся сначала от второго ограничения, в то время как ограничение одной материальной точкой будет пока сохранено.

В качестве предварительной подготовки мы выведем наше волновое уравнение с помощью символического приёма, который понадобится при дальнейших обобщениях.

А. Силы обладают не зависящим от времени потенциалом. В этом случае имеет место закон сохранения энергии, который можно записать в виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = W, \quad (1)$$

где H — выраженная через импульсы p и координаты q функция Гамильтона, причём p явно входит в выражение $\frac{p^2}{2m}$ для кинетической энергии, а q — неявно в потенциальную энергию V . Можно получить из H дифференциальное уравнение в частных производных классической механики для функции действия S , если, как это было показано в т. I, гл. II, § 6, заменить p на

$$p = \frac{\partial S}{\partial q}.$$

Мы утверждаем, что аналогично этому можно получить дифференциальное уравнение в частных производных волновой механики для шредингеровской функции ψ , если заменить p на дифференциальный символ¹⁾

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (2)$$

¹⁾ Здесь надо сделать следующие замечания. В то время как в классической механике уравнение $p = \frac{\partial S}{\partial q}$ пригодно для любых (в том числе и криволинейных) координат, применимость аналогичного соотношения (2) в квантовой механике ограничена прямоугольными (декартовыми) координатами. Для того чтобы использовать

и применить выражение $H - W$ как оператор к функции ψ :

$$(H - W)\psi = 0. \quad (2a)$$

Для вывода этого весьма формального предписания заметим, что (2) приводит в прямоугольных координатах к следующему выражению:

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta.$$

Таким образом, с помощью (1) и (2) мы приходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (V - W)\psi = 0,$$

которое совпадает с волновым уравнением (1.11):

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V)\psi = 0. \quad (3)$$

Б. Силы не обладают потенциалом, но тем не менее энергия сохраняется. Такой случай может иметь место при наличии не зависящего от времени магнитного поля. Сила в магнитном поле, как известно, направлена перпендикулярно к скорости частицы и потому не меняет её энергии. Теория относительности указывает путь, следуя которому можно включить такие силы в общую схему механики. Если составить скалярное произведение 4-тока электрона

$$\frac{e}{c} (v_x, v_y, v_z, ic)$$

с 4-потенциалом

$$(A_x, A_y, A_z, i\varphi),$$

то мы получим (ср. т. I, дополнение 5):

$$\frac{e}{c} (\mathbf{v}A) - e\varphi. \quad (4)$$

Здесь φ относится к единичному заряду, поэтому $e\varphi$ представляет собой отнесённую к заряду электрона e потенциальную энергию электростатического происхождения, которую мы обозначали ранее через V . Таким образом, в силу (4) при учёте магнитостатических сил вместо прежнего V полагается

$$V - \frac{e}{c} (\mathbf{v}A). \quad (4a)$$

При этом функция Лагранжа (фигурирующая в формулировке принципа Гамильтона) не будет более равняться

$$L = T - V,$$

но

$$L = T - V + \frac{e}{c} (\mathbf{v}A). \quad (4b)$$

В дополнении 3 будет показано, что из этой функции Лагранжа действительно получают правильные уравнения движения электрона в магнитном

соотношение (2) в случае более общих координат, сначала надо подвергнуть оператор H «симметризации», т. е. встречающиеся в нём выражения вида, например, qp^2 надо заменить pqr или же на $\frac{1}{2}(p^2q + qp^2)$ и т. п. Ср. Schrödinger, Abhandl. z. Wellenmechanik, стр. 72.

поле. Там же мы выведем по общим правилам механики функцию Гамильтона $H(p, q)$ из функции Лагранжа $L(q, \dot{q})$, а именно, получим:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 + V, \quad (4в)$$

где квадрат надо понимать как скалярное произведение и притом (ср. примечание на стр. 40) выраженное в декартовых координатах. Используя (2), получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A \right)^2 \psi = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{\hbar e}{2imc} \{ \text{div} (A\psi) + (A \text{ grad } \psi) \} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \psi. \end{aligned}$$

Но в силу основных положений электродинамики (ср. конец дополнения 3) в нашем случае $\text{div} A = 0$ и, следовательно, $\text{div} (A\psi) = (A \text{ grad } \psi)$; поэтому последняя строка предпоследнего выражения упрощается:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta \psi + \frac{2e}{i\hbar c} (A \text{ grad } \psi) - \left(\frac{e}{\hbar c} A \right)^2 \psi \right].$$

Если подставить это в (4в) и построить выражение $(H - W)\psi = 0$, то получим общее волновое уравнение в статическом магнитном поле с вектор-потенциалом A :

$$\Delta \psi + \frac{2e}{i\hbar c} (A \text{ grad } \psi) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (W - V) - \left(\frac{e}{\hbar c} A \right)^2 \right] \psi = 0. \quad (5)$$

В том специальном случае, когда A можно рассматривать как малое возмущение, в (5) можно опустить последний член. Возникающее тогда уравнение

$$\Delta \psi + \frac{2e}{i\hbar c} (A \text{ grad } \psi) + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0 \quad (5а)$$

можно получить и непосредственно из (1), если заменить там V выражением (4а). Тем не менее избранный нами путь через точное выражение (4в) для функции Гамильтона является единственным последовательным путём и незаменим для дальнейшего (например, для установления уравнения Дирака).

В. Силы обладают потенциалом, зависящим от времени; энергия не сохраняется. Как и ранее, мы будем понимать под H выражение

$$H = \frac{p^2}{2m} + V, \quad (6)$$

где теперь, однако, V зависит от t . В таком случае дифференциальное уравнение классической механики (ср. т. I, дополнение 5) имеет вид:

$$H(p, q, t) + s = 0, \quad \text{где } p = \frac{\partial S}{\partial q}, \quad s = \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (7)$$

Чтобы совершить переход к волновой механике, мы дополним (2) дифференциальным символом

$$s = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad (8)$$

и введём вместо волновой функции ψ зависящую от времени волновую функцию

$$u(x, y, z, t).$$

К этой функции мы и будем применять оператор (7). Таким образом, мы приходим к пространственно-временному волновому уравнению; именно, в силу (2), (6) и (8):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + Vu + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad (9)$$

или

$$\Delta u - \frac{2m}{\hbar^2} Vu + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (9a)$$

Проверкой такого обобщения может служить переход к случаю А, когда V не зависило от t . При этом t становится «циклической» координатой и, следовательно, можно положить

$$u(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t}. \quad (10)$$

Тогда в силу постулата де Бройля в форме (2.27) из (9) после сокращения яа временной множитель непосредственно следует:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0, \quad (11)$$

т. е. в точности волновое уравнение (3) случая А. [К вопросу о выборе знака при i в (10) мы сейчас вернёмся.]

Если сопоставить переход от B к A , т. е. переход от пространственно-временного уравнения (9) для функции u к пространственному уравнению (11) для функции ψ с проведённым в § 1 переходом от оптического пространственно-временного уравнения (1.5) для функции u к оптическому пространственному уравнению (1.6) для функции ψ , то легко заметить следующую разницу: наше уравнение (9) не является как (5) уравнением гиперболического типа, но принадлежит к типу «уравнений диффузии». Именно, оно содержит не «ускорение» $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$, а «скорость» $\frac{\partial u}{\partial t}$. Здесь, однако, идёт речь о диффузии с мнимым «коэффициентом диффузии» и поэтому не об экспоненциально затухающих со временем, как это характерно для обычных диффузионных явлений, а о периодических решениях, что мы и использовали в подстановке (10). Можно заметить, что справедливо и обратное, именно, что гиперболическое уравнение с мнимой постоянной распространения привело бы к временной зависимости диффузионного характера.

Г. Силы не обладают потенциалом, закон сохранения энергии не выполняется внутри системы. Под первым условием мы понимаем, что, как и в пункте Б, к возможным потенциальным силам электрического происхождения добавляются магнитные силы, задаваемые вектор-потенциалом A . Второе условие приводит к зависящей от времени волновой функции u и дифференциальному уравнению, включающему время. Мы получим это дифференциальное уравнение из (7) и (8) немедленно, если используем для H выражение (4в). Таким образом, мы можем записать:

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A \right)^2 + V + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right\} u = 0. \quad (12)$$

При проведении вычисления надо воспользоваться соотношением (8) дополнения 3. Получается:

$$\Delta u - \frac{2m}{\hbar^2} \left(V + \frac{\hbar}{2imc^2} \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \right) u + \frac{2e}{\hbar c} (A \text{ grad } u) + \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (12a)$$

Член с $\frac{\partial V}{\partial t}$ (в силу знаменателя mc^2 , равного энергии покоя электрона) не имеет, собственно, в нерелятивистской теории никаких прав на существование. Если опустить его, равно как и член с A^2 [ср. переход от (5) к (5а)], то уравнение примет более простой вид:

$$\Delta u - \frac{2m}{\hbar^2} Vu - \frac{2ie}{\hbar c} (A \text{ grad } u) + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (12б)$$

Это уравнение можно рассматривать как суперпозицию уравнений (5а) и (9).

Здесь уместно остановиться на выборе знака мнимой единицы в предыдущем уравнении. Естественно, что этот знак принципиально неопределён. Мы могли бы, например, написать при переходе от В к А вместо правой части (10):

$$u = \psi(x, y, z) e^{+i\omega t}. \quad (10а)$$

Но тогда мы должны были бы изменить знак при i и в дифференциальных символах (8) и (2), т. е. заменить их на

$$s = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad (8а) \quad \text{и} \quad p = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}. \quad (2а)$$

Тем самым меняется, естественно, и знак члена с $\frac{\partial u}{\partial t}$ в (9), и мы получаем снова с помощью (10а) то же самое уравнение (11) для ψ , что и ранее с помощью (10).

То же самое справедливо и для более общего уравнения (12): при использовании дифференциальных символов (8а) и (2а) вместо (8) и (2) уравнение (12б) переходит в сопряжённое уравнение, в котором мы обозначим зависимое переменное через v , а не через u :

$$\Delta v - \frac{2m}{\hbar^2} Vv + \frac{2ie}{\hbar c} (A \text{ grad } v) - \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial v}{\partial t} = 0. \quad (12в)$$

В следующем параграфе мы увидим, что это сопряжённое уравнение находится в тесной аналитической связи с первоначальным и что все физические заключения, которые мы могли бы вывести из одного из этих уравнений, можно вывести и из другого. Существенным для таких заключений является не отдельное уравнение или отдельная волновая функция, но пара уравнений (12б, в) и пара функций (u , v).

Д. Случай многих частиц в потенциальном поле. При наличии многих частиц мы ограничимся сейчас рассмотрением простейшего случая А, т. е. случая, когда силы, действующие на частицы или между частицами, могут быть получены из потенциальной энергии и когда поэтому выполняется закон сохранения энергии. Мы будем нумеровать частицы индексом α (масса m_α , координаты x_α , y_α , z_α , импульс p_α). В общем случае потенциальная энергия зависит от всех x_α , т. е. $V = V(x_1, \dots, x_\alpha, \dots)$. Выражение (1) для функции Гамильтона надо тогда заменить на

$$H = \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V(x_1, \dots, x_{\alpha}, \dots).$$

Заменяя импульсы с помощью (2), мы образуем из этого выражения оператор, который будем применять к волновой функции, зависящей теперь от всех координат x_α , y_α , z_α . Получаем:

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \psi + \frac{1}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0. \quad (13)$$

Индекс α у Δ указывает, что надлежит образовывать дифференциальный оператор Δ в пространстве прямоугольных координат $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$ α -й материальной точки.

Переход от этого простейшего случая к случаям, аналогичным Б, В и Г, происходит по развитым там формальным правилам. Например, в самом общем случае Г получаем для многих частиц (электронов и ядер), вообще говоря, с различными зарядами e_α вместо (12б) уравнение

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \Delta_{\alpha} u - \frac{1}{\hbar^2} V u - \sum_{\alpha} \frac{ie_{\alpha}}{\hbar c m_{\alpha}} (A(x_{\alpha}, y_{\alpha}, z_{\alpha}) \text{grad}_{\alpha} u) + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (14)$$

§ 7. УРАВНЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ. ТОК И ПЛОТНОСТЬ. НОРМИРОВКА И ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ. СТАТИСТИЧЕСКОЕ ТОЛКОВАНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Мы будем исходить из дифференциального уравнения для u , причём ради краткости изложения ограничимся рассмотрением одной материальной точки. Тогда будут иметь место уравнения (6.9а) или (6.12а), в зависимости от того, действуют ли только силы, обладающие потенциалом V , или также и силы магнитной природы, связанные с векторным потенциалом A . В обоих случаях речь идёт о линейном дифференциальном уравнении, которое мы будем записывать сокращённо в виде:

$$L(u) = 0.$$

Рассмотрим сопряжённое дифференциальное уравнение

$$M(v) = 0.$$

Для его определения служит теорема Грина, играющая, как известно, фундаментальную роль во всей математической физике. Мы запишем её здесь, отступая от исторически обусловленной интегральной формы, в следующем виде:

$$vL(u) - uM(v) = \text{Div } S. \quad (1)$$

S означает здесь четвёрку компонент $S = (S_1, S_2, S_3, S_4)$, которую мы будем называть «потоком».

Символ Div означает, что правая часть должна быть построена из суммы производных по независимым переменным, здесь x, y, z, t :

$$\text{Div } S = \frac{\partial S_1}{\partial x} + \frac{\partial S_2}{\partial y} + \frac{\partial S_3}{\partial z} + \frac{\partial S_4}{\partial t}. \quad (1a)$$

Из требования (1) можно получить аналитическое выражение как для сопряжённого дифференциального выражения $M(v)$, так и для «потока» S .

В дополнении 4 мы обсудим применение теоремы Грина в дифференциальной и в интегральной форме для случая самых общих линейных дифференциальных выражений; сейчас мы ограничимся дифференциальными уравнениями типа уравнения (6.12а), из которого можно получить и (6.9а), положив $A = 0$. Запишем левую часть (6.12а) сокращённо в виде:

$$\left. \begin{aligned} L(u) &= \Delta u + i\alpha \frac{\partial u}{\partial t} - i\beta (A \text{grad } u) - \gamma u + i\delta u, \\ \alpha &= \frac{2m}{\hbar}, \quad \beta = \frac{2e}{\hbar c}, \quad \gamma = \frac{2m}{\hbar^2} V + \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} A^2, \quad \delta = \frac{1}{\hbar c^2} \frac{\partial V}{\partial t}. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Чтобы преобразовать $vL(u)$ в требуемом (1) смысле, воспользуемся очевидными соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} v \Delta u &= u \Delta v + \operatorname{div} (v \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} v), \\ v \frac{\partial u}{\partial t} &= -u \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (uv), \\ v (A \operatorname{grad} u) &= -u (A \operatorname{grad} v) - uv \operatorname{div} A + \operatorname{div} (uvA). \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Получим:

$$vL(u) = u \left[\Delta v - i\alpha \frac{\partial v}{\partial t} + i\beta (A \operatorname{grad} v) - \gamma v + i(\delta + \beta \operatorname{div} A) v \right] + \\ + \operatorname{div} (v \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} v - i\beta uvA) + i\alpha \frac{\partial}{\partial t} (uv).$$

Сравнение с (1) показывает, как следует выбирать сопряжённое дифференциальное выражение M и «поток» S :

$$M(v) = \Delta v - i\alpha \frac{\partial v}{\partial t} + i\beta (A \operatorname{grad} v) - \gamma v + i(\delta + \beta \operatorname{div} A) v, \quad (4)$$

$$\left. \begin{aligned} S_{1,2,3} &= v \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} v - i\beta uvA, \\ S_4 &= i\alpha uv. \end{aligned} \right\} \quad (4a)$$

Последний член в (4) может быть ещё упрощён. В силу уравнения (8) дополнения 3

$$\operatorname{div} A = -\frac{1}{\epsilon \epsilon} \frac{\partial V}{\partial t},$$

следовательно,

$$\beta \operatorname{div} A = -\frac{2}{\hbar c^2} \frac{\partial V}{\partial t};$$

с другой стороны, у нас было обозначено

$$\delta = \frac{1}{\hbar c^2} \frac{\partial V}{\partial t},$$

откуда

$$\delta + \beta \operatorname{div} A = -\frac{1}{\hbar c^2} \frac{\partial V}{\partial t} = -\delta.$$

Итак, мы можем написать вместо (4)

$$M(v) = \Delta v - i\alpha \frac{\partial v}{\partial t} + i\beta (A \operatorname{grad} v) - \gamma v - i\delta v. \quad (5)$$

Итак, сравнение (5) и (2) показывает, что дифференциальным выражением, сопряжённым с L , является комплексно сопряжённое выражение, оно получается из L путём изменения знака у i . Поэтому в числе решений сопряжённого уравнения $M(v) = 0$ всегда должно содержаться решение, комплексно сопряжённое рассматриваемому решению первоначального уравнения $L(u) = 0$:

$$v = u^*. \quad (5a)$$

При таком выборе v для «потока» S по (5a) получается

$$\left. \begin{aligned} S_{1,2,3} &= u^* \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} u^* - i\beta uu^*A, \\ S_4 &= i\alpha uu^*. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Из соображений размерности мы выделим из этого четырёхкомпонентного выражения множитель

$$i\alpha = \frac{2im}{h}$$

и объединим после этого три первые компоненты в один трёхмерный вектор \mathbf{j} ; для четвёртой компоненты мы введём обозначение ρ . Итак, напишем:

$$S = \frac{2im}{h} (\mathbf{j}, \rho) \quad (6a)$$

и, учитывая значение β , (2), получим из (6):

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2im} (u^* \text{grad } u - u \text{grad } u^*) - \frac{e}{mc} uu^* \mathbf{A}, \\ \rho &= uu^*. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Мы будем называть ρ *плотностью*, а \mathbf{j} — *током* (точнее «плотностью частиц» и «током частиц»). Как раз эти величины ρ и \mathbf{j} можно — более или менее непосредственно — сравнивать с опытом. Они симметричным образом зависят от u и u^* . Таким образом, мы подтвердили утверждение, сделанное после формулы (6.12), что физическое значение имеет не отдельная волновая функция u , но пара функций u , $v = u^*$ и что физические явления определяются лишь совместно взятыми сопряжёнными друг к другу дифференциальными выражениями $L(u)$ и $M(v)$, причём безразлично, из какого из этих двух дифференциальных выражений исходить. Тем самым устранена и встретившаяся в предыдущем параграфе двузначность в выборе знака при i .

В качестве примера использования определения (7) вычислим ток в x -направлении, соответствующий плоской волне:

$$u = e^{ikx - i\omega t}, \quad u^* = e^{-ikx + i\omega t}$$

(ток в y - и z -направлениях отсутствует; \mathbf{A} надо положить равным нулю). Получаем:

$$\rho = uu^* = 1 \quad (7a)$$

и

$$u^* \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial u^*}{\partial x} = 2ik, \quad \mathbf{j} = j_x = \frac{\hbar k}{m}. \quad (7b)$$

Но, в силу соотношения де Бройля, $\hbar k$ является импульсом соответствующей частицы, следовательно, $\frac{\hbar k}{m}$ — её скоростью. Если, как это сделано здесь, положить амплитуду плоской волны (а тем самым и плотность) равной единице, то ток частицы совпадает со скоростью частицы, как это и должно быть.

После того как мы выбрали u и $v = u^*$ в качестве решений уравнений $L = 0$ и $M = 0$, в силу (1) для S имеет место *уравнение непрерывности*

$$\text{Div } S = 0.$$

В наших новых обозначениях оно гласит:

$$\text{div } \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (8)$$

т. е. изменение плотности происходит в результате переноса частиц в полном соответствии с уравнением непрерывности гидродинамики

$$\text{div}(\rho \mathbf{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

в котором ρ означает плотность вещества, а $\rho\vartheta$ — плотность импульса или поток вещества. Путём умножения на заряд электрона e мы получаем из наших плотности частиц ρ и тока частиц j *плотность заряда* $e\rho$ и *плотность тока* $e j$, которые, следовательно, также связаны между собой уравнением непрерывности.

Проинтегрируем теперь (8) по всему пространству. Обозначая через $d\tau$ элемент объёма, получаем:

$$\int \operatorname{div} j d\tau = \int j_n d\sigma = 0,$$

поскольку j исчезает на бесконечно удалённой замкнутой поверхности σ — это предположение, вообще говоря, справедливо. Тогда мы заключаем, исходя из (8), что

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho d\tau = 0, \quad \int \rho d\tau = \text{const}, \quad (9)$$

т. е. не зависит от t . Нашему толкованию «плотности частиц» будет соответствовать выбор константы равной единице, так как мы имеем здесь дело с одной частицей, а проинтегрированная плотность частиц должна совпадать с числом частиц.

Итак, мы потребуем

$$\int \rho d\tau = 1,$$

т. е. учитывая (7),

$$\int u u^* d\tau = 1. \quad (10)$$

Это соотношение является *условием нормировки* волновой функции u или сопряжённой функции $\vartheta = u^*$. Мы будем коротко говорить, что условием (10) волновая функция «нормируется на единицу». Так как u и ϑ были определены ранее через линейные однородные дифференциальные уравнения, то в них оставалась ещё неопределённой входящая множителем постоянная C . Если положить теперь

$$C = N e^{i\gamma t}, \quad N = |C|, \quad (11)$$

то требование (10) определит абсолютную величину N этой постоянной, в то время как фаза γ попрежнему останется неопределённой. Уравнение (9), как это подчёркивает Шредингер, обеспечивает сохранение нормировки: если волновая функция пронормирована на единицу в какой-либо момент времени, то эта нормировка сохранится для всех последующих времён. Это необходимо для того, чтобы было возможно наше понимание числа частиц, заряда и т. д.

В тех случаях (пункты А и Б § 6), когда энергия сохраняется, можно утверждать большее. Тогда решения зависят от времени экспоненциально и можно говорить о собственных значениях энергии и собственных функциях (пространственно-временная собственная функция u , пространственная собственная функция ψ). Положим, как и в (6.10),

$$\left. \begin{aligned} u &= \psi_n e^{-i\omega_n t}, & u^* &= \psi_n^* e^{i\omega_n t}, \\ \omega_n &= \frac{W_n}{\hbar}, \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

где индекс n означает, что мы выбрали некоторую определённую собственную функцию. Тогда из (11) и (12) следует *условие нормировки* для соб-

ственных функций, зависящих только от координат:

$$\int \psi_n \psi_n^* d\tau = 1. \quad (13)$$

Однако ничто не заставляет нас выбирать в (12) одинаковые собственные значения для u и u^* . Действительно, наше уравнение непрерывности (8) относилось к каким-либо двум решениям u и v уравнений $L(u) = 0$ и $M(v) = 0$. Поэтому мы можем написать вместо (12):

$$\left. \begin{aligned} u &= \psi_n e^{-i\omega_n t}, & v &= \psi_m^* e^{+i\omega_m t}, \\ \omega_n &= \frac{W_n}{\hbar}, & \omega_m &= \frac{W_m}{\hbar}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Тогда определения (7) потока и плотности переходят в

$$\left. \begin{aligned} J_{mn} &= \left\{ \frac{\hbar}{2im} (\psi_m^* \text{grad } \psi_n - \psi_n \text{grad } \psi_m^*) - \frac{e}{mc} \psi_n \psi_m^* A \right\} e^{-i(\omega_n - \omega_m)t}, \\ \rho_{mn} &= \psi_n \psi_m^* e^{-i(\omega_n - \omega_m)t}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Мы можем назвать эти величины *смешанным током* и *смешанной плотностью* обоих энергетических состояний n и m или же *током перехода* и *плотностью перехода* между этими двумя состояниями¹⁾. Для этих величин также выполняется уравнение (8) в форме

$$\text{div } J_{mn} + \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = 0. \quad (16)$$

Отсюда следует аналог уравнения (9):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho_{mn} d\tau = -i(\omega_n - \omega_m) \int \psi_n \psi_m^* d\tau \cdot e^{-i(\omega_n - \omega_m)t} = 0. \quad (17)$$

Так как по предположению $\omega_n \neq \omega_m$, то мы можем разделить второй интеграл на $\omega_n - \omega_m$ и, замечая, что во втором уравнении (9) теперь следует положить $\text{const} = 0$, получаем:

$$\int \psi_n \psi_m^* d\tau = 0. \quad (18)$$

Это уравнение составляет *условие ортогональности* собственных функций. Оно справедливо для любой пары собственных функций одного и того же волнового уравнения, которые принадлежат к *разным* собственным значениям. Если существует много волновых функций, которые относятся к одному и тому же собственному значению (случай вырождения, ср. стр. 38), то сразу за ортогональность ручаться нельзя, но её можно достигнуть в каждом конкретном случае.

Уравнение (18) было выведено сейчас из общей теоремы непрерывности. Мы можем, конечно, получить его и более элементарным способом Фурье из теоремы Грина:

$$\int (u \Delta v - v \Delta u) d\tau = \int \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) d\sigma, \quad (19)$$

где можно считать, что правая часть исчезает при переходе к бесконечно удалённой поверхности. Если мы возьмём уравнение простейшего типа

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0$$

¹⁾ Обозначения: *диагональные* или *недиагональные элементы матриц тока* или *плотности* будут обоснованы в гл. III.

и выберем $u = \psi_n$, $v = \psi_m^*$, то в левой части Δu и Δv будут соответственно пропорциональны $(W_n - V)\psi_n$ и $(W_m - V)\psi_m^*$. Мы получим поэтому из (19) (член с V выпадает):

$$(W_m - W_n) \int \psi_n \psi_m^* d\tau = 0, \quad (19a)$$

т. е. снова уравнение (18), так как $W_m \neq W_n$.

Мы касались пока в этом параграфе только задач, относящихся к одной частице. Обобщим теперь наше рассмотрение на случай многих частиц. Если исходить из общего, задаваемого (6.14) дифференциального выражения $L(u)$, то в качестве сопряжённого выражения $M(v)$ снова получим комплексно сопряжённое с (6.14). Правая часть уравнения (1) будет теперь равна:

$$\text{Div } S = \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\alpha} \text{div}_{\alpha} j_{\alpha} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right), \quad (20)$$

$$\left. \begin{aligned} j_{\alpha} &= \frac{\hbar}{2im_{\alpha}} (v \text{ grad}_{\alpha} u - u \text{ grad}_{\alpha} v) - \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha}c} uvA, \\ \rho &= uv. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Индекс α у символов div и grad означает, что дифференцирование должно проводиться по координатам α -й частицы; индексом α снабжены и величины e и m , так как они могут, вообще говоря, относиться не только к электронам, но и в равной степени к ядрам.

В силу (21) ток является теперь уже не трёхмерным, а $3n$ -мерным вектором; он составляется из n трёхмерных векторов:

$$j_1, \dots, j_{\alpha}, \dots, j_n,$$

каждый из которых, так же как и волновые функции u , u^* и плотность uu^* , зависит от всех $3n$ координат частиц.

Интегрированием уравнения непрерывности $\text{Div } S = 0$ по всем $3n$ координатам x_{α} , y_{α} , z_{α} из (20) получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho d\tau = 0,$$

следовательно, если мы выберем $v = u^*$ и сохраним «нормировку на единицу», то

$$\int \rho d\tau = \text{const} = 1. \quad (22)$$

Мы будем называть $3n$ -мерное пространство координат *конфигурационным пространством* (в противоположность $6n$ -мерному *фазовому пространству* координат и импульсов). Волновое уравнение, ток и плотность относятся к конфигурационному пространству и поэтому в общем случае задачи многих частиц теряют физическую наглядность.

Однако физически очевидно, что и в случае задачи многих частиц должно существовать уравнение сохранения для каждой отдельной частицы. Мы получим его по предложенному Шредингером способу, если фиксируем координаты рассматриваемой частицы (индекс β) и проинтегрируем по координатам всех остальных частиц α . Тогда, в силу (20), из многомерного уравнения сохранения $\text{div } S = 0$ получится

$$\text{div } \bar{j}_{\beta} + \frac{\partial \bar{\rho}_{\beta}}{\partial t} = 0. \quad (23)$$

Входящие сюда величины $\bar{\rho}_\beta$ и \bar{j}_β определяются равенствами:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_\beta &= \int uu^* d\tau_\beta, \\ \bar{j}_\beta &= \frac{\hbar}{2im_\beta} \int (u^* \text{grad}_\beta u - u \text{grad}_\beta u^*) d\tau_\beta - \frac{e_\beta}{m_\beta c} \int uu^* A d\tau_\beta, \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

а $d\tau_\beta$ указывает на интегрирование по всему конфигурационному пространству, исключая интегрирование по $x_\beta, y_\beta, z_\beta$. При этом интегрировании сумма по α в (20) вырождается в единственный член $\text{div } \bar{s}_\beta$, в то время как все члены с $\alpha \neq \beta$ превращаются в интегралы по бесконечно удалённой поверхности и обращаются в нуль.

Благодаря (23) мы можем говорить о трёхмерном облаке заряда и токе отдельной частицы. Однако вычислить их мы можем только через многомерное волновое уравнение и интегрирование по многомерному конфигурационному пространству. В следующей главе мы познакомимся с характерным примером такого положения вещей (задача Кеплера с учётом движения ядра).

Только после всего сказанного мы можем перейти к обсуждению физического значения волномеханических величин, и то лишь к весьма поверхностному, так как дальнейшие шаги в этом направлении связаны с соотношением неопределённости, которым мы займёмся лишь в гл. III.

Ясно, что волновая механика не может изменить того обстоятельства, что электрон является зарядом, сконцентрированным в весьма малом объёме. Однако казалось бы, что непрерывно распределённая плотность ρ волномеханического облака заряда и непрерывно распределённый волномеханический ток j противоречат этому. Противоречие уничтожается, как это впервые было предложено М. Борном¹⁾, *статистической трактовкой* волновой механики. Волновая функция $u(x, y, z, t)$ одноэлектронной задачи определяет *вероятность*, с которой электрон может быть найден в момент времени t в точке x, y, z . Точнее говоря, эта вероятность задаётся для элемента координатного объёма $d\tau$ действительной величиной

$$uu^* d\tau.$$

Тем самым условие нормировки (6.16)

$$\int uu^* d\tau = 1$$

приобретает следующий вероятностный смысл: электрон с достоверностью может быть обнаружен в какой-либо точке пространства.

Статистическое толкование распространяется и на ток j . Если мы говорим, что в элементе объёма $d\tau$ течёт ток j_α , то мы не имеем при этом в виду, что число частиц, пересекающих единицу поверхности в единицу времени, в точности равно j_α , но утверждаем, что вероятное значение, или *математическое ожидание*, этого числа частиц равно j_α . В гл. III мы познакомимся с общим правилом, дающим возможность вычислять «математические ожидания» не только тока, но и любых других наблюдаемых величин волномеханической системы.

То же самое справедливо и в случае многих частиц. Тогда вероятность найти систему из n частиц в определённом месте конфигурационного пространства внутри $3n$ -мерного элемента объёма $d\tau$ задаётся выражением

$$uu^* d\tau,$$

1) M. Born, Zs. f. Phys. 38, 803 (1926); 40, 167 (1927).

где u зависит от t и от $3n$ пространственных координат x_n, \dots . Снова вероятность того, что система находится где-то в пространстве, равна единице:

$$\int uu^* d\tau = 1. \quad (25)$$

Итак, в то время как в качестве физического элемента волновой механики выступает квадратичная и действительная величина uu^* (или $\psi\psi^*$ в случае собственных функций), её аналитическим элементом является линейная и, вообще говоря, комплексная величина u (или ψ). Эта величина подчиняется линейному дифференциальному уравнению волновой механики, и её определение предшествует вероятностному рассмотрению; u (или ψ) называют *амплитудой вероятности*. Сама вероятность вычисляется из неё так, как в оптике интенсивность, — через «норму» амплитуды, а математическое ожидание тока — как поток энергии в оптике.

Соотношения здесь аналогичны существующим в теории электромагнитного поля: физическими величинами, которые в конце концов наблюдаются в электромагнитных опытах, являются компоненты тензора энергии-импульса, следовательно, квадратичные функции напряжённостей поля. Но простые дифференциальные уравнения, именно уравнения Максвелла, имеют место не для них, а для их линейных множителей, для напряжённостей поля. Напряжённости поля можно рассматривать как математические вспомогательные величины, служащие только для вычисления собственно физических энергетико-динамических соотношений.

В следующей главе мы сравним волномеханические облака заряда с дискретными кеплеровскими орбитами прежней теории и сможем описать первые как результат статистического усреднения последних. Правда, это усреднение производится не совсем обычным образом. Именно, в волновой механике возникает конечная, хотя и весьма малая, плотность заряда далеко вне области прежних орбит, следовательно, в областях, где обычная статистика привела бы к вероятности, равной нулю. Речь идёт, следовательно, о некоторой новой статистике, которая хотя и весьма родственна, но всё же не идентична обычной статистике вычисленных по классической механике орбит.

Наконец, мы можем теперь обосновать сделанное на стр. 18 утверждение, что в множителе, определяющем зависимость собственных функций от времени, частота определяется формулой де Бройля (2.7) с точностью до произвольной постоянной, так что, например, мы могли бы пользоваться формулой (2.27) $h\nu = W = E - E_0$.

В самом деле, ток и плотность в уравнениях (15) зависят только от разностей частот начального и конечного состояний и, следовательно, не зависят от их абсолютной нормировки. То, что зависимость от времени волновых функций, взятых сами по себе, зависит от выбора частоты, не играет никакой роли, так как мы должны рассматривать их как вычислительные величины, служащие для того, чтобы устанавливать статистические следствия относительно электронов (или, в более общем виде, частиц), которые только и являются физически наблюдаемыми.

§ 8. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ КООРДИНАТ И МЕТОД ВЕКТОРНОГО ПОТЕНЦИАЛА. ДИПОЛЬНОЕ И КВАДРУПОЛЬНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Мы определили выше распределение плотности ρ в облаке заряда электрона и можем теперь вычислить, исходя из этого распределения, его момент по отношению к координате q ($q = x, y, z$). Для этого каждый элемент $\rho d\tau$ умножим на плечо q и проинтегрируем по всему объёму.

Получим:

$$M = \int q\rho \, d\tau. \tag{1}$$

Таким образом мы определим вектор M с составляющими M_x, M_y, M_z . Будучи умноженным на e , M приобретает смысл *электрического дипольного момента*, например для $q = x$ — x -компоненты электрического момента нашего распределения заряда. Интенсивность и поляризация излучения выражаются в электродинамике, как это было показано ещё Герцем¹⁾, через вторую производную от электрического момента по времени $e\ddot{M}$. Мы можем использовать поэтому (1) для описания излучения света атомами и молекулами.

Так же как и для рассмотренной в предыдущем параграфе плотности, мы будем говорить здесь не только о моменте одного состояния, но и о смешанном моменте двух состояний, в особенности двух собственных функций. При этом мы имеем в виду [ср. (7.15)] выражение

$$M_{mn} = \int q\rho_{mn} \, d\tau = \int q\psi_n^* \psi_m^* \, d\tau e^{-i(\omega_n - \omega_m)t}. \tag{2}$$

Как правило, мы будем предпочитать для обозначения введённой величины M абстрактное слово «матричный элемент» физически наглядному «электрический момент». На самом деле эта наглядность чисто кажущаяся и существует действительно только в случае $n = m$, когда обе функции ψ_n и ψ_m^* относятся к одному и тому же состоянию. Происхождение названия «матричный элемент» станет ясным из гл. III, § 4.

Рассмотрим сперва одно отдельное состояние, полагая $n = m$. В этом случае плотность ρ и момент M не будут зависеть от времени и излучение (как вторая производная от M по времени) обратится в нуль. В собственных состояниях (соответствующих стационарным орбитам прежней теории) излучения не происходит.

Рассмотрим теперь переход $n \leftrightarrow m$. Плотность ρ_{nm} и момент M_{nm} будут теперь периодически зависеть от времени. В силу (2) частота момента, а потому и излучения будет равна:

$$\nu = \frac{\omega_n - \omega_m}{2\pi} = \frac{E_n - E_m}{h}. \tag{3}$$

Мы получили здесь *условие частот* Бора (ср. начало § 1), которое оказывается, таким образом, естественно включённым в общую схему волновой механики, как и квантовое условие. Мы не хотим сказать, что получили здесь, хотя бы и на классической основе, вывод условия частот.

¹⁾ Мы сошлёмся на уравнения (1)—(3) § 5, гл. I I тома. Для заряда, сосредоточенного в точке, составляющей электрического момента в x -направлении будет ex , следовательно, второй производной от момента по времени — $e\ddot{x}$. Тогда уравнение (2) даст

$$S = \frac{e^2}{4\pi c^3} \frac{\ddot{M}_\perp^2}{r^2}, \tag{I}$$

где M_\perp означает составляющую M , перпендикулярную к направлению излучения S ; аналогично уравнение (3) определяет полное излучение S (черта сверху означает усреднение по времени, знак $|\ |$ — переход к модулю вектора):

$$S = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{M}|^2. \tag{II}$$

В такой форме уравнения (I) и (II) пригодны не только для точечного заряда, но и для заряда, распределённого произвольным образом, что и используется в тексте.

Действительно, фактически мы положили его в основу изложения уже в нашем допущении о зависимости отдельных состояний от времени по соотношению де Бройля (2.9). Однако существенно, что мы получаем исходящую из классической теории вычислительную схему, которая даёт возможность предсказать такие детали излучения, как поляризацию и интенсивность. Именно, из (2) мы заключаем следующее.

Если для определённых чисел n и m и для определённого направления в пространстве, например для $q = x$, M_{mn} обращается в нуль, то мы получаем *правило поляризации*. Переход $n \rightleftharpoons m$ не приводит к излучению, соответствующему колебанию вектора E в x -направлении.

Если для заданных n , m , M_{mn} обращается в нуль для каждого $q = x, y, z$, то переход $n \rightleftharpoons m$ не может сопровождаться излучением. Мы интерпретируем это, говоря, что такой переход запрещён ¹⁾. Таким образом, мы получаем *правила отбора*.

Если M_{mn} отличен от нуля, то в силу примечания к стр. 53 мы получаем из M_{mn} меру интенсивности соответствующего перехода и соответствующего направления поляризации.

Для более аккуратного определения этой меры интенсивности надо заметить следующее: к переходу $n \rightleftharpoons m$ относится не только матричный элемент, представляемый (2), но и равноправный с ним

$$M_{nm} = \int q \psi_m^* \psi_n e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} d\tau,$$

который мы можем, конечно, записать как M_{mn}^* . Следовательно,

$$M_{nm} = M_{mn}^*, \text{ равно как и } |M_{nm}| = |M_{mn}|. \quad (4)$$

Мы можем выразить это также (ср. гл. III, § 5) и словами: M_{mn} образуют *эрмитову матрицу*.

Поэтому полный электрический момент перехода мы определим следующим образом:

$$M = M_{mn} + M_{nm} = \int q \psi_n^* \psi_m d\tau e^{-i(\omega_n - \omega_m)t} + \text{компл. сопр.} \quad (5)$$

Он является действительной величиной, причём равной не просто действительной части, но удвоенной действительной части M_{mn} .

Соотношение (5) относится к переходу между двумя различными состояниями ψ_n, ψ_m . Если речь идёт об электрическом моменте единственного состояния, то существует только один матричный элемент M_{nn} , который действителен сам по себе и представляется выражением

$$M = M_{nn} = \int q \psi_n^* \psi_n d\tau. \quad (5a)$$

Для средних значений квадратов M (надо учесть, что при возведении (5) в квадрат квадраты M_{nm} и M_{mn} уничтожатся при усреднении по времени, так что сохраняются только удвоенные произведения) из (5) и (5a) следует:

$$\overline{M^2} = \begin{cases} 2M_{nm}M_{mn} = 2|M_{nm}|^2, & n \neq m, \\ M_{nn}^2, & n = m. \end{cases} \quad (6)$$

¹⁾ Гочнее, запрещено «дипольное» излучение. См. конец этого параграфа.

Так как \bar{M}_{nm} отличается от M_{nm} только действительным множителем $-(\omega_n - \omega_m)^2$, то мы получаем одновременно

$$\bar{M}^2 = \begin{cases} 2(\omega_n - \omega_m)^2 |M_{nm}|^2, & n \neq m, \\ 0, & n = m \text{ из-за } \omega_n = \omega_m. \end{cases} \quad (6a)$$

Эти выражения в соответствии с примечанием на стр. 53 и являются уточнением уже указанной выше меры интенсивности перехода $n \leftrightarrow m$. Вторая строка в (6a) отвечает при этом уже подчеркнутому обстоятельству, что в стационарных состояниях не происходит излучения.

При рассмотрении вырожденных состояний (состояний с одинаковым собственным значением, т. е. с $\omega_n = \omega_m$, но с разными собственными функциями $\psi_n \neq \psi_m$) также надлежит пользоваться соотношением (5), т. е. сохранять множитель 2 в первом из уравнений (6).

В следующих параграфах мы выведём, следуя намеченному здесь пути, правила отбора для осциллятора и ротатора, которые будут затем в следующей главе перенесены на линейчатые и полосатые спектры и приведут к важным заключениям о виде этих спектров; кроме того, мы вычислим и интенсивности разрешённых правилами отбора переходов.

Мы рассматривали до сих пор только собственные функции, т. е. состояния, экспоненциально зависящие от времени. Но наши определения можно перенести и на волновые функции, зависящие от времени произвольным образом. Если u и U — две такие функции, то, следуя (5), мы определим электрический момент перехода $u \leftrightarrow U$ соотношением

$$M = e \int quU^* d\tau + \text{компл. сопр.}, \quad (7)$$

а электрический момент самого состояния u :

$$M = e \int qui^* d\tau. \quad (7a)$$

Удобный способ записи матричных элементов был предложен Дираком:

$$(n_1, n_2, \dots, |q| m_1, m_2, \dots), \quad (7b)$$

где n_1, n_2, \dots — параметры (квантовые числа), характеризующие одно состояние ψ_n , а m_1, m_2, \dots — параметры, характеризующие другое состояние ψ_m . Вместо q в многоэлектронных задачах будет стоять $\sum q_\alpha$, причём интегрирование надо будет выполнять не по пространству трёх измерений, как это мы делали до сих пор, но по конфигурационному пространству $3n$ измерений (n — число частиц). Запись (7b) особенно удобна, потому что наряду с матричными элементами координаты q используются также и матричные элементы других величин (скорости, импульса и т. д.), что в такой записи легко находит своё выражение. Подробнее по этому поводу см. гл. III, § 4.

Мы хотим теперь обобщить метод матричных элементов и придти к методу «электродинамических потенциалов». Относительно их четырёхмерного определения мы отсылаем читателя к дополнению 5, уравнениям (8) — (10). Здесь же мы ограничимся приведением обычных выражений для скалярного и векторного потенциалов:

$$\varphi = \int \frac{\rho}{r_{PQ}} d\tau, \quad A = \frac{1}{c} \int \frac{\rho v}{r_{PQ}} d\tau. \quad (8)$$

В r_{PQ} P означает точку наблюдения с координатами X, Y, Z во время T , а Q — точку интегрирования с координатами x, y, z в момент времени,

взятый с запаздыванием:

$$t' = T - \frac{r_{PQ}}{c}; \quad (9)$$

это запаздывание выражает тот известный факт, что действие источника Q распространяется в точку P со скоростью света.

Поле излучения E и H получается из (8) путём образования «четырёхмерного ротора» [ср. дополнение 6, уравнение (12) и сл.] или в трёхмерной записи как

$$E = -\text{grad } \varphi - \frac{1}{c} \dot{A}, \quad H = \text{rot } A, \quad (10)$$

где дифференцирование производится по координатам X, Y, Z и T точки наблюдения P .

Мы подставим в (8) для плотности ρ и плотности тока $\rho\mathcal{O}$ их волномеханические значения ρ_{nm} и j_{nm} из (7.15), а именно:

$$\rho_{nm} = \rho e^{-2\pi i \nu t'}, \quad j_{nm} = j e^{-2\pi i \nu t'}, \quad (10a)$$

где ρ и j означают не зависящие от времени множители, например $\rho = e\psi_n \psi_m^*$, а ν во временном множителе означает частоту излучения при переходе $m \rightarrow n$, именно:

$$\nu = \frac{W_n - W_m}{h}.$$

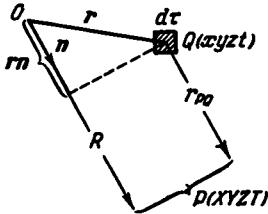


Рис. 7.

Простой вид временной зависимости в уравнении (10) приводит к упрощению волномеханических вычислений по сравнению с соответствующими вычислениями в классической электродинамике, где, вообще говоря, зависимость от времени носит сложный (не экспоненциальный) характер. Выражения упрощаются и ещё больше благодаря тому, что нас будет

интересовать только бесконечно удалённая точка наблюдения $P(XYZ) \rightarrow \infty$. Расположим внутри облака заряда некоторое начало отсчёта O (например, ядро атома) и обозначим расстояние OP через R , а единичный вектор в направлении от O к P через n (рис. 7). Далее, вектор интегрирования обозначим через $\vec{OQ} = r$. Тогда, как это ясно из рис. 7:

$$r_{PQ} = R - (rn) \quad (11)$$

и поэтому, в силу (9),

$$\left. \begin{aligned} t' &= T - \frac{R}{c} + \frac{1}{c} (rn), \\ e^{-2\pi i \nu t'} &= e^{-2\pi i \nu \left(T - \frac{R}{c}\right)} e^{-\frac{2\pi i \nu}{c} rn}. \end{aligned} \right\} \quad (11a)$$

Подставляя (10), (11) и (11a) в (8), получаем:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi \\ A \end{array} \right\} = \frac{e^{-2\pi i \nu \left(T - \frac{R}{c}\right)}}{R} \int \left\{ \begin{array}{l} \rho \\ j/c \end{array} \right\} e^{-\frac{2\pi i \nu}{c} (rn)} d\tau + \text{компл. сопр.} \quad (12)$$

Здесь мы заменили входивший в (8) знаменатель r_{PQ} просто на R , так как если использовать точное значение (11) и провести разложение в ряд по

¹⁾ Множитель e добавлен здесь потому, что в (8) ρ означает плотность заряда, но не плотность числа частиц. То же справедливо и для j .

обратным степеням R , то дополнительный член (rn) приведёт к появлению лишь таких членов, которыми можно пренебречь при $R \rightarrow \infty$. (В противоположность экспоненте знаменатель «нечувствителен» к запаздыванию.) Далее из самого смысла уравнений (6), (6а) следует, что нужно добавить сопряжённое выражение, которое относится к той же частоте $\pm 2\pi\nu$, так как электродинамические потенциалы должны быть действительными величинами.

Мы будем различать два случая:

А. Размеры облака заряда являются малыми по сравнению с длиной волны $\lambda = \frac{c}{\nu}$ излучения. Этот случай имеет место при излучении видимого света ($\lambda \sim 5 \cdot 10^{-5}$ см) и при дискретных собственных значениях (тогда облако заряда имеет, как это будет показано в следующей главе, размеры порядка атомных размеров 10^{-8} см).

Б. Размеры облака заряда сравнимы с длиной волны излучения. Этот случай имеет место для рентгеновского спектра ($\lambda \sim 10^{-8}$ см), а также для видимого света, если оба собственных состояния, между которыми происходит переход, относятся к непрерывному спектру (в последнем случае облако заряда обладает гораздо большей протяжённостью, чем при дискретных собственных значениях, ср. опять следующую главу).

В случае А экспоненциальный множитель под интегралом в (12) будет порядка единицы (так как $\frac{r}{\lambda} \ll 1$). Тогда из (12) будет следовать:

$$A = \frac{e^{-2\pi i\nu\left(r - \frac{R}{c}\right)}}{R} \int \frac{j}{c} d\tau + \text{компл.-сопр.} \quad (13)$$

Как следует в этом случае приближённо вычислять скалярный потенциал φ , мы обсудим ниже. Здесь же мы хотим показать, что вычисление A можно свести к рассматривавшемуся нами ранее матричному элементу. Для этого мы обратимся к уравнению непрерывности (7.8), которое после подстановки (10а) и освобождения от временной зависимости гласит:

$$\text{div } j = 2\pi i\nu\rho. \quad (14)$$

Умножая его на x и интегрируя по $d\tau$, находим:

$$\int x \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \right) d\tau = 2\pi i\nu \int \rho x d\tau. \quad (15)$$

С помощью интегрирования по частям первый член в левой части можно преобразовать к виду:

$$- \int j_x d\tau + \int x j_x dy dz = - \int j_x d\tau, \quad (15а)$$

так как двойной интеграл в левой части (15а) распространяется на бесконечно удаленную поверхность и в случае А гарантированно обращается в нуль. Точно так же пропадают поверхностные интегралы и при преобразовании двух других членов левой части (15), которые после выполнения интегрирования по y и по z дают:

$$\int x j_y dx dz, \quad \int x j_z dy dx.$$

Тем самым уравнение (15) приводится к простому виду:

$$\int j_{\omega} d\tau = -2\pi i\nu \int \rho x d\tau,$$

или в более общей записи, где $q = x, y, z$:

$$\int j d\tau = -2\pi i\nu \int \rho q d\tau. \quad (16)$$

Мы подставим это выражение в (13) и заменим $\rho e^{-2\pi i\nu T}$ на введённую уравнением (2) величину ρ_{mn} в которой t заменено на время T точки наблюдения. Используя определение M_{mn} из (2), получим:

$$A = -\frac{2\pi i\nu}{c} e M_{mn} \cdot \frac{e^{-2\pi i\nu \frac{R}{c}}}{R} + \text{компл. сопр.}, \quad (17)$$

что можно, учитывая характер зависимости M_{mn} от времени, переписать также и в виде:

$$A = \frac{e}{c} \dot{M}_{mn} \frac{e^{-2\pi i\nu \frac{R}{c}}}{R} + \text{компл.-сопр.} \quad (17a)$$

Если мы образуем теперь из (17a) и соответствующего уравнения для φ (см. ниже) напряжённости полей E и H путём дифференцирования по координатам X, Y, Z, T точки наблюдения [ср. (10)], то мы получим, учитывая общий вид зависимости M_{mn} от времени, выражения, пропорциональные \dot{M}_{mn} . Таким образом, уравнения (I) и (II) примечания на стр. 53 окажутся обоснованными с волномеханической точки зрения. Тем самым установлена связь между методами электродинамических потенциалов и матричных элементов. Как мы видим, эта связь основывается на уравнении непрерывности для электрического заряда и имеет место только тогда, когда можно заменить единицей «множитель запаздывания» в (12) (случай А).

В случае Б «множитель запаздывания» $e^{-\frac{2\pi i\nu}{c}(rn)}$ в (12) полагать равным единице конечно нельзя; однако при дифференцировании по координатам бесконечно удалённой точки наблюдения его можно считать постоянным, несмотря на то, что n (ср. рис. 7) имеет смысл:

$$n = \left(\frac{X}{R}, \frac{Y}{R}, \frac{Z}{R} \right);$$

действительно, дифференцирование этого множителя привело бы к возникновению дополнительной степени R^{-1} и соответствующим членом всё равно надо было бы пренебречь. В равной степени можно считать постоянным при дифференцировании по X, Y, Z и знаменатель $\frac{1}{R}$, что ясно из замечания, сделанного после уравнения (12).

Поэтому, для того чтобы получить поля E и H , нам достаточно дифференцировать только стоящий в (12) вне знака интеграла множитель

$\exp \left\{ -2\pi i\nu \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\}$. Получаем:

$$\left. \begin{matrix} E \\ H \end{matrix} \right\} = -\frac{2\pi i\nu}{c} \frac{e^{-2\pi i\nu \left(T - \frac{R}{c} \right)}}{R} \int \left\{ \begin{matrix} \rho n - \frac{j}{c} \\ \left[\frac{j}{c} n \right] \end{matrix} \right\} e^{-\frac{2\pi i\nu}{c}(rn)} d\tau + \text{компл.-сопр.} \quad (18)$$

Легко заметить, что в выражении для E члены с ρ и j получаются из $-\text{grad } \varphi$ и $-\frac{1}{c} \dot{A}$ соответственно. В дополнении (5) мы ещё раз вернёмся к этому вычислению с более общей точки зрения.

Покажем теперь, что поле, представляемое (18), обладает хорошо известными свойствами поля герцевского диполя

$$H = [nE], \quad (19a) \quad (nE) = 0, \quad (19b)$$

т. е. векторы E , H и n взаимно перпендикулярны, а E и H совпадают по абсолютной величине. Для доказательства (19a) достаточно помножить выражение (18) для E под знаком интеграла векторно на n , при этом член с ρ выпадает в силу $[nn] = 0$ и остаётся как раз выражение (18) для поля H . Для доказательства (19b) будем исходить из уравнения непрерывности (14).

Умножим его на $e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)}$ и проинтегрируем по $d\tau$; тогда с помощью интегрирования по частям, совершенно аналогичного проведённому в (15), (15a):

$$\int \text{div } j e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)} d\tau = \frac{2\pi i \nu}{c} \int (jn) e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)} d\tau,$$

уравнение непрерывности (14) приводится к виду:

$$\int \left\{ \frac{1}{c} (jn) - \rho \right\} e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)} d\tau = 0. \quad (20)$$

Но мы получили тот самый интеграл, который возникает, если помножить (18) скалярно на n под знаком интегрирования. Тем самым (19b) доказано.

Мы используем соотношение (20) для того, чтобы упростить выражение (18) для поля E . Действительно, достаточно помножить (20) на n под знаком интеграла, чтобы убедиться в том, что член ρn в (18) можно заметить на

$$\frac{1}{c} (jn)n.$$

Тогда {...} в (18) перейдёт в

$$-\frac{1}{c} (j - (jn)n) = -\frac{1}{c} j_{\perp}, \quad (20a)$$

где j_{\perp} означает нормальную к n составляющую вектора тока j , поскольку вычитающийся в (20a) вектор $(jn)n$ представляет собой составляющую вектора тока, параллельную n . Поэтому, учитывая ещё и (19a), мы можем записать вместо (18)

$$\left. \begin{aligned} E &= \frac{2\pi i \nu}{c^2} e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(T-\frac{R}{c})} \int j_{\perp} e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)} d\tau + \text{компл.-сопр.}, \\ H &= [nE], \quad |H| = |E|. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Изучим подробнее комплекс излучений, содержащийся в этом представлении. Для этого разложим «множитель запаздывания» в ряд:

$$e^{-\frac{2\pi i \nu}{c}(rn)} = 1 - \frac{2\pi i \nu}{c}(rn) + \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi i \nu}{c}\right)^2 (rn)^2 + \dots \quad (22)$$

Первый член отвечает, конечно, нашему прежнему случаю А. Мы будем

называть эту часть полного излучения *дипольным* излучением. (Учитывая дальнейшие обозначения «квадрупольное» и «мультипольное» излучение, было бы разумнее говорить вместо этого «бипольное» излучение.) Второй член приводит к комплексу излучений, который разлагается на *электрическое* *квадрупольное* и *магнитное* *дипольное* излучения. Третий член приводит к излучению, которое содержит *электрическое* *октупольное* излучение. В общем случае мы будем говорить о *мультипольном* излучении или о 2^n -излучении; n означает при этом степень, в которой входит в подинтегральное выражение радиус-вектор r точки интегрирования; при этом $(n - 1)$ множителей rn возникают из разложения (22), а последний множитель r содержится в выражении (21) для j_{\perp} .

В дополнении 5 мы рассмотрим подробнее особенно важное для астрофизики *квадрупольное* излучение и его связь с *дипольным* и *мультипольным* излучением и выясним условия, при которых его можно наблюдать в лабораторных условиях. Вообще говоря, *квадрупольное* излучение оказывается весьма слабым по сравнению с *дипольным* (по порядку величины $\sim 10^{-6}$). То, что *квадрупольное* излучение вообще заслуживает рассмотрения, зависит от наличия общих правил отбора: линии, для которых *дипольное* излучение запрещено, разрешены для *квадрупольного*, и наоборот. История вопроса требует, чтобы мы назвали здесь двух основателей этой области физики: Дж. С. Бовена, отождествившего линии небуля и линию полярных сияний с запрещёнными переходами в спектре кислорода (запрещёнными в смысле *дипольного* излучения), и А. Рубиновича, который развил систематическую теорию *мультипольного* излучения, установил правила отбора и интенсивности для *квадрупольного* излучения и (что особенно важно для экспериментальной проверки!) предсказал эффект Зеемана для таких переходов.

Вернёмся в заключение ещё раз к *дипольному* излучению, чтобы предупредить возможность одного недоразумения. Мы характеризовали случай A тем, что можно пренебречь множителем запаздывания, и пришли к уравнению (13) для векторного потенциала A . Если бы мы поступили бы также со скалярным потенциалом φ , то в выражении, аналогичном (13), возник бы интеграл

$$\int \rho d\tau = \int \psi_n \psi_m^* d\tau = 0 \quad (23)$$

(ортогональность). Мы получили бы, следовательно, $\varphi = 0$ и, в силу (10),

$$E = -\frac{1}{c} \dot{A}.$$

Но из этого следует вместо (21) такое представление для E , в котором вместо j_{\perp} стоит просто j . Что такой результат должен содержать ошибку, видно уже из того, что мы не получаем требования (196) — поперечности E . В действительности дело состоит в том, что для получения *дипольного* излучения надлежит всегда обрывать разложение (22) на первом не исчезающем члене [в случае φ — на втором члене в (22)]. Тогда получится

$$-\frac{2\pi i v}{c} \int \rho(rn) d\tau. \quad (24)$$

Это выражение того же самого порядка величины, что и интеграл для A , который возник при сохранении только первого члена в разложении (22).

Мы заключаем отсюда, что при вычислении дипольного излучения было бы ошибочным отбрасывать запаздывание уже в потенциале и, следовательно, писать $\varphi = 0$. Это можно делать только, исходя из разложений (22) для напряжённостей полей.

**§ 9. НОРМИРОВКА, ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ
И МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ОСЦИЛЛЯТОРА И РОТАТОРА**

А. Линейный осциллятор. В соответствии с (5.17) напомним для собственных функций:

$$\left. \begin{aligned} \psi_n &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} N H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{a}x, \quad a = \frac{m\omega_0}{\hbar}, \\ H_n(\xi) &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (\text{собственная частота}). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Выражения для φ_n включают теперь нормировочный множитель (действительный) N . Мы отказались при этом от добавления возможного фазового множителя $e^{i\tau}$ [ср. (7.11a)].

Уравнение (7.13) приводит к требованию (трёхмерный элемент объёма $d\tau$ надо заменить на одномерный $dx = \frac{d\xi}{\sqrt{a}}$):

$$N^2 X = \sqrt{a}, \quad X = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi. \quad (2)$$

Чтобы определить X , подставим в (2) вместо одного из множителей H его представление (1). Получаем:

$$X = (-1)^n \int \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi,$$

и далее, путём n -кратного интегрирования по частям (учитывая, что все производные $e^{-\xi^2}$ на границах области интегрирования $\xi = \pm \infty$ обращаются в нуль) находим:

$$X = \int e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n}{d\xi^n} d\xi.$$

Если записать теперь временно

$$H_n(\xi) = a_n \xi^n + \dots,$$

то получим:

$$X = a_n n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = a_n n! \sqrt{\pi}.$$

Обычная нормировка полиномов Эрмита согласно (5.12) выражалась условием

$$a_n = 2^n \quad (3)$$

и, следовательно, $X = 2^n n! \sqrt{\pi}$. Поэтому

$$N^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{a}{\pi}}, \quad (4)$$

откуда получается также и

$$\frac{N_n}{N_{n+1}} = \sqrt{2(n+1)}. \quad (4a)$$

На этом мы покончим с *нормировкой* для осциллятора. С другой стороны, требование ортогональности, записанное через ψ , гласит

$$\int \psi_n \psi_m d\xi = 0 \quad (5)$$

и приводит к следующему соотношению для полиномов H :

$$\int e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi = 0, \quad n \neq m. \quad (5a)$$

Это соотношение нетрудно получить из представления (1) для H с помощью последовательных интегрирований по частям. Здесь мы получили его в качестве непосредственного следствия ортогональности собственных функций осциллятора, что является более поучительным.

Переходим теперь к матричным элементам линейного осциллятора. Положим в (8.2) $q = x$, опустим временной множитель и обозначим пространственный множитель через x_{nm} . Учитывая, что ψ действительны, напишем:

$$x_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_n \psi_m dx. \quad (6)$$

Если вместо x ввести безразмерную переменную ξ из (1), то получим:

$$ax_{nm} = \xi_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi \psi_n(\xi) \psi_m(\xi) d\xi. \quad (7)$$

Покажем, что ξ_{nm} отлично от нуля только при выполнении условия $m = n \pm 1$.

Будем считать сначала, что $n < m$. Подставляя в (7) вместо ψ_n и ψ_m их представления из (1), получим вместо (7):

$$\xi_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{n+1} H_m e^{-\xi^2} d\xi. \quad (8)$$

Здесь

$$G_{n+1}(\xi) = N_n N_m \xi H_n(\xi). \quad (8a)$$

Следовательно, G_{n+1} есть полином степени $n+1$. Но любой полином степени $n+1$ можно столь же хорошо, как из последовательных степеней $\xi^0, \xi^1, \dots, \xi^{n+1}$, составить и из полиномов H :

$$G_{n+1}(\xi) = \sum_{\nu=0}^{n+1} c_\nu H_\nu(\xi) \quad (9)$$

Коэффициенты c_ν этого выражения находятся путём последовательного приравнивания друг другу коэффициентов при всех степенях ξ , начиная с ξ^{n+1} до ξ^0 , в правой и левой частях (9). Некоторые из коэффициентов c_ν могут обращаться в нуль (так, например, в нашем случае, когда n нечётно, обратятся в нуль все коэффициенты c_ν с чётными ν), однако наверняка $c_{n+1} \neq 0$. Подставляя разложение (9) в (8), получаем:

$$\xi_{nm} = \sum_{\nu=0}^{n+1} c_\nu \int_{-\infty}^{+\infty} H_\nu H_m e^{-\xi^2} d\xi. \quad (10)$$

Но согласно условию ортогональности (5а) и допущению $n < m$ все члены этого ряда обращаются в нуль, за возможным исключением члена $\nu = n + 1$, причём последнее может произойти только, если

$$m = n + 1. \quad (11)$$

В этом случае мы получаем, учитывая определение (2) величины X :

$$\xi_{n, n+1} = \frac{c_{n+1} \sqrt{a}}{N_{n+1}^2}. \quad (12)$$

Обратный случай

$$m < n$$

сводится к предыдущему перестановкой m и n . Таким образом, вместо (11) в качестве условия необращения ξ_{nm} в нуль мы получаем теперь

$n = m + 1$ и, следовательно, $m = n - 1$, а вместо (12)

$$\xi_{n, n-1} = \frac{c_n \sqrt{a}}{N_n^2}. \quad (12a)$$

Нам остаётся ещё раз рассмотреть тривиальный случай

$$m = n,$$

когда

$$\xi_{nn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi \psi_n^2 d\xi = 0, \quad (12b)$$

поскольку ψ_n^2 чётно, и, следовательно, $\xi \psi_n^2$ нечётно относительно ξ .

Тем самым нами доказано *правило отбора* для гармонического осциллятора. Принимая во внимание рассуждения стр. 54, мы можем сказать: все переходы $n \rightarrow m$ запрещены, за исключением переходов $n \rightarrow n \pm 1$.

Вопрос о *поляризации* излучения осциллятора является тривиальным, так как имеется только одно направление колебаний (направление оси x). Поэтому перейдём сейчас к вопросу об *интенсивности*. Для этого вычислим коэффициент c_{n+1} в (12). Мы обозначили ранее коэффициент при старшей степени ξ^n в H_n через a_n . Тогда, в силу (8а), полагая $m = n + 1$, коэффициент при старшей степени ξ^{n+1} в G_{n+1} будет равен

$$N_n N_{n+1} a_n.$$

Сравнение членов с одинаковыми степенями ξ^{n+1} в (9) даёт теперь немедленно

$$N_n N_{n+1} a_n = c_{n+1} a_{n+1}. \quad (13)$$

Согласно (3) отсюда следует:

$$c_{n+1} = \frac{1}{2} N_n N_{n+1}, \quad (14)$$

вследствие чего, в силу (12) и (4а):

$$\xi_{n, n+1} = \frac{\sqrt{a}}{2} \frac{N_n}{N_{n+1}} = \sqrt{\frac{a}{2} (n+1)}. \quad (15)$$

Вернёмся к нашему первоначальному матричному элементу $x_{n, n+1}$ в (7) и получим благодаря (7) и (1):

$$x_{n, n+1} = \frac{1}{a} \xi_{n, n+1} = \sqrt{\frac{n+1}{2a}} = \sqrt{\frac{(n+1) \hbar}{2m\omega_0}}. \quad (16)$$

В равной степени будет, конечно, и (замена n на $n - 1$)

$$x_{n-1, n} = x_{n, n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}}. \quad (16a)$$

Эти формулы сыграли историческую роль при сравнении волномеханического метода Шредингера с более старым матричным методом Гейзенберга (ср. гл. III, § 5).

Если мы теперь восстановим в матричном элементе временной множитель, то благодаря (8.2) сможем написать:

$$M_{n, n\pm 1} = x_{n, n\pm 1} e^{-i(\omega_n - \omega_{n\pm 1})t}. \quad (17)$$

Но, в силу (5.10),

$$\omega_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega_0, \quad \omega_n \pm \omega_{n+1} = \mp \omega_0.$$

Тем самым благодаря (16) и (17)

$$|\tilde{M}_{n, n+1}|^2 = \frac{(n+1)\hbar\omega_0^3}{2m}, \quad (18)$$

и соответственно благодаря (16a) и (17)

$$|\tilde{M}_{n, n-1}|^2 = \frac{n\hbar\omega_0^3}{2m}. \quad (18a)$$

В силу примечания на стр. 53 эти выражения определяют интенсивность обших спонтанных переходов:

$$n+1 \rightarrow n \quad \text{и} \quad n \rightarrow n-1.$$

Б. Ротатор в пространстве. Независимыми переменными для ротатора являются углы ϑ и φ . Прямоугольные координаты вращающейся материальной точки (обозначаемые с помощью ξ , η , ζ) выражаются через ϑ и φ следующим образом:

$$\xi + j\eta = a \sin \vartheta e^{j\varphi}, \quad \zeta = a \cos \vartheta. \quad (19)$$

Мы написали здесь j вместо $\pm i$, чтобы отличить этот неопределённый знак от другого, который появится позже. Собственными функциями ¹⁾, в силу (5.20), будут

$$\psi_{lm} = NP_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (20)$$

Определим добавленный сюда нормировочный множитель N с помощью (7.13). При этом вместо интегрирования по пространству мы должны интегрировать по поверхности единичного шара, следовательно, вместо dt писать

$$d\omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

Таким образом, получаем:

$$N^2 \int [P_l^m(\cos \vartheta)]^2 d\omega = 1. \quad (21)$$

Удобно расщепить N на два множителя: N_l , который относится к ϑ и соответствует квантовому числу l , и N_m , который относится к φ и соответствует

¹⁾ Мы заменили здесь стоявший в (5.20) нижний индекс j на l , так как имеем в виду прежде всего дальнейшие применения в кеплеровой задаче (l — «азимутальное» квантовое число, m — «магнитное» квантовое число).

квантовому числу m :

$$N = N_l N_m. \quad (22)$$

N_m находится немедленно, так как зависимость от φ выпадает при образовании $\psi\psi^*$:

$$2\pi N_m^2 = 1, \quad N_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (23)$$

Для N_l , если положить $\cos \theta = x$, представить P_l^m с помощью (3.166) и действовать так же, как и в случае осциллятора, получается условие

$$\frac{1}{N_l^2} = \int_{-1}^{+1} G(x) \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} dx. \quad (24)$$

Введённое здесь сокращение G означает

$$G = \frac{(1-x^2)^m}{2^{2l} l! l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l.$$

Высшей степенью x в G является x^{l+m} . Коэффициент при этой степени равен

$$a = (-1)^m \frac{2l(2l-1)\dots(l-m+1)}{2^{2l} l! l!} = \frac{(-1)^m}{2^{2l} l! l!} \frac{(2l)!}{(l-m)!}. \quad (25)$$

Путём последовательного интегрирования по частям из (24) получается [множители $(1 \pm x)$ обеспечивают исчезновение проинтегрированных членов]:

$$\frac{1}{N_l^2} = (-1)^{l+m} (l+m)! a \int_{-1}^{+1} (x^2-1)^l dx. \quad (26)$$

Обозначим через q_l интеграл, который ещё осталось здесь вычислить. Выведем для него рекуррентную формулу. Именно:

$$\begin{aligned} q_l &= \int_{-1}^{+1} (x^2-1)^l dx = \int_{-1}^{+1} (x^2-1)^{l-1} x^2 dx - \int_{-1}^{+1} (x^2-1)^{l-1} dx = \\ &= \frac{1}{2l} \int_{-1}^{+1} x \frac{d}{dx} (x^2-1)^l dx - q_{l-1} = -\frac{1}{2l} q_l - q_{l-1}. \end{aligned}$$

откуда следует

$$q_l = -\frac{2l}{2l+1} q_{l-1}. \quad (27)$$

Для $l=0$ непосредственным вычислением получаем:

$$q_0 = 2, \quad (28)$$

в силу чего из рекуррентной формулы (27) следует:

$$q_l = (-1)^l \frac{2l(2l-2)(2l-4)\dots 2}{(2l+1)(2l-1)(2l-3)\dots 3} \cdot 2 = (-1)^l \cdot 2 \cdot \frac{(2^l) \eta^2}{(2l+1)!}. \quad (29)$$

Наконец, объединяя уравнения (25), (26) и (29), получаем:

$$\frac{1}{N_l^2} = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (30)$$

В частности, для $m = 0$, находим хорошо известную из теории полиномов Лежандра формулу:

$$\frac{1}{N_l^2} = \frac{2}{2l+1}. \quad (30a)$$

Полный нормировочный множитель оказывается, в силу (22), (23) и (30), равным

$$\frac{1}{N_l^2} = \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (31)$$

Подчеркнём, что эта формула, равно как и представление (3.16б), из которого она была получена, справедливы не только для положительных, но и для отрицательных m . При обычном способе записи, когда пользуются только положительными m и когда в (20) пишут $e^{\pm i m \varphi}$ вместо $e^{i m \varphi}$, уравнение (31) можно было бы использовать только для положительных m . То, что мы получили здесь единую формулу для $m \geq 0$, является чрезвычайно удобным и обусловлено тем, что для $m < 0$ наши P_l^m не совпадают с $P_l^{|m|}$, отличаясь от них множителем (3.16г):

$$C_{lm} = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!}.$$

Посмотрим теперь, к каким заключениям относительно шаровых функций приведёт общее условие ортогональности. Рассмотрим две собственные функции:

$$\psi_{lm} \text{ и } \psi_{l'm'}.$$

До тех пор, пока $m \neq m'$, условие ортогональности вообще не приводит ни к каким нетривиальным выводам, так как, в силу

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = 0,$$

оно переходит в $0 = 0$. Выберем поэтому $m' = m$; мы придём тогда к формуле

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(x) P_{l'}^m(x) dx = 0, \quad l \neq l'. \quad (32)$$

Подчеркнём снова, что для доказательства этого свойства ортогональности шаровых функций (как лежандровых, так и присоединённых) нам не понадобилось проводить специального вычисления: оно получилось как автоматическое следствие общей теоремы об ортогональности собственных функций.

Перейдём теперь к вычислению матричных элементов прямоугольных координат (19). Так как мы рассматриваем переход $l'm' \rightarrow lm$, то должны снабжать их четырьмя индексами:

$$\left. \begin{aligned} \zeta_{lm, l'm'} &= \int \zeta \psi_{lm} \psi_{l'm'}^* d\omega, \quad d\omega = \sin \theta d\theta d\varphi, \\ (\xi + j\eta)_{lm, l'm'} &= \int (\xi + j\eta) \psi_{lm} \psi_{l'm'}^* d\omega. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Однако мы покажем, что матричные элементы первой или соответственно второй строки (33) отличаются от нуля лишь при

$$m' = m \quad \text{или} \quad \text{соответственно} \quad m' = m \pm 1, \quad (34)$$

так что после подстановки нужного значения m' можно написать:

$$\zeta_{\eta}, (m' = m) \text{ и } (\xi + j\eta)_{\eta}, (m' = m \pm 1), \quad (34a)$$

причём каждому знаку j определённым образом [см. (34б)] относится одно из значений $m' = m \pm 1$.

Доказательство (34) заключается в том, что матричные элементы для ζ или соответственно $(\xi + j\eta)$ содержат следующие интегралы по φ :

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \text{ или соответственно } \int_0^{2\pi} e^{j\varphi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi.$$

Они не обращаются в нуль и оказываются равными 2π лишь при

$$m - m' = 0$$

или же соответственно

$$j + l(m - m') = 0,$$

т. е. когда

$$\left. \begin{aligned} j = +l, m' - m = +1, \\ j = -l, m' - m = -1, \end{aligned} \right\} \quad (34б)$$

что и доказывает «правило отбора» (34). Это правило отбора гласит: возможны только такие переходы, для которых «магнитное» квантовое число либо остаётся неизменным, либо меняется на ± 1 .

Однако тем самым мы одновременно установили и «правило поляризации»: случай $m' = m$ соответствует колебанию параллельно оси ζ (электрическому моменту, изменяющемуся в этом направлении), случай $m' = m \pm 1$ означает круговое колебание в плоскости ζ, η , поляризованное по правому или левому кругу (соответственно лежащему в этой плоскости электрическому моменту, который меняется только по направлению, но не по величине). Необходимо добавить, что ось ζ можно только тогда отличить на опыте от других направлений, когда она выделена физически, например магнитным полем. Таким образом, наше правило поляризации вступает в силу не для обычной кеплеровой задачи, но только при рассмотрении эффекта Зеемана для неё (ср. гл. II, § 7), равно как и для эффекта Зеемана в полосатых спектрах.

Перейдём теперь к правилу отбора для l и покажем, что оно состоит в условии

$$l' = l \pm 1. \quad (35)$$

Для этого мы должны рассмотреть величины ζ_{η} и $(\zeta + j\eta)_{\eta}$.

Заменяя интегралы по φ на 2π и учитывая правило отбора (24) для φ , получим согласно (19), (20) и (22):

$$\zeta_{\eta} = 2\pi a N_{lm} N_{l'm} J, \quad (\xi \pm l\eta)_{\eta} = 2\pi a N_{lm} N_{l'm \pm 1} K, \quad (36)$$

$$\left. \begin{aligned} J &= \int_0^{\pi} \cos \vartheta P_l^m(\cos \vartheta) P_{l'}^m(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta, \\ K &= \int_0^{\pi} \sin \vartheta P_l^m(\cos \vartheta) P_{l'}^{m \pm 1}(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Мы могли бы вычислить эти интегралы так же, как и соответствующий

интеграл (8) для осциллятора, именно путём сравнения степеней входящих в (37) полиномов по $x = \cos \vartheta$. Однако мы предпочтём прибегнуть к более короткому, хотя и менее элементарному и более искусственному методу, который описан в дополнении 6. Он показывает непосредственно, что $J = K = 0$, кроме случаев $l' = l \pm 1$. Тем самым наше правило отбора (35) доказано. Значения интегралов J и K в случае $l' = l \pm 1$ приведены в формулах (11) и (12) дополнения 6. Из них на основании уравнения (36) можно получить матричные элементы для ζ и $(\xi \pm i\eta)$. Мы заимствуем их для перехода $l \rightarrow l-1$ из уравнений (13) и (14) дополнения 6:

$$\left. \begin{aligned} \zeta_{l, l-1} &= a \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} & (m' = m), \\ (\xi + i\eta)_{l, l-1} &= -a \sqrt{\frac{(l-m-1)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} & (m' = m+1), \\ (\xi - i\eta)_{l, l-1} &= a \sqrt{\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}} & (m' = m-1). \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

Те же выражения справедливы и для перехода $l \rightarrow l+1$, если заменить в них l на $l+1$, что также показано в дополнении 6.

Матричные элементы отличны от нуля только для выписанных в правой части (38) переходов. Поэтому мы можем дополнить (38) соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} \zeta_{l, l-1} &= 0, & m' = m \pm 1, \\ (\xi + i\eta)_{l, l-1} &= 0, & m' = m-1 \text{ или } m' = m, \\ (\xi - i\eta)_{l, l-1} &= 0, & m' = m+1 \text{ или } m' = m. \end{aligned} \right\} \quad (38a)$$

В то время как «круговые» матричные элементы $\xi \pm i\eta$ действительны, «линейные» матричные элементы величин ξ и η в отдельности могут быть и мнимыми, как это непосредственно усматривается из сравнения (38) и (38a).

До сих пор мы рассматривали только отдельные, специализированные выбором m , переходы. Однако экспериментально их нельзя выделить, так как энергия ротатора зависит не от m , а лишь от l . Даже при наложении магнитного поля переходы, отличающиеся значением m , не разделяются энергетически. Можно только различать три выделенных в (38) типа переходов $\Delta m = 0, \pm 1$, которые на опыте различаются по поляризации испускаемого света. Мы заключаем отсюда, что как в случае наличия магнитного поля, так и в случае его отсутствия нам надлежит просуммировать по всем значениям m от $m = -l$ до $m = l$, и притом интенсивности, а не амплитуды, так как относящиеся к различным m собственные состояния следует считать некогерентными между собой. В отсутствие магнитного поля различие между состояниями с разной поляризацией (линейной, круговой) при этом пропадает и остаётся только сумма квадратов матричных элементов:

$$\Sigma = \sum_m (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2).$$

Построим сначала $\Sigma \zeta^2$. Согласно формуле

$$\sum_{-l}^{+l} m^2 = \frac{l}{3} (l+1)(2l+1) \quad (39)$$

мы получаем из (38)

$$\sum r^2 = a^2 \sum_{-l}^{+l} \frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)} = \frac{a^2}{3} l. \quad (40)$$

Теперь нам надо вычислить $\sum (\xi^2 + \eta^2)$. Чтобы можно было использовать (38), преобразуем эту сумму:

$$\sum (\xi^2 + \eta^2) = \sum \left(\frac{\xi + l\eta}{\sqrt{2}} \right)^2 + \sum \left(\frac{\xi - l\eta}{\sqrt{2}} \right)^2, \quad (41)$$

благодаря чему каждому переходу $m \rightarrow m \pm 1$ будет, согласно (38а), соответствовать только один отличный от нуля член в правой части. Так как

$$\sum_{-l}^{+l} m = 0,$$

то мы получаем из второй и третьей строк (38):

$$\sum \left(\frac{\xi + l\eta}{\sqrt{2}} \right)^2 = \sum \left(\frac{\xi - l\eta}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{a^2}{3} l. \quad (42)$$

Поэтому складывая (40) и (41), мы получаем:

$$\sum = a^2 l. \quad (43)$$

С помощью примечания на стр. 53 из \sum получается полная интенсивность, отвечающая некоторой линии спектра ротатора при переходе $l \rightarrow l-1$, т. е. при отсутствии расщепления m -составляющих. Аналогичным образом мы получим для перехода $l \rightarrow l+1$, который отвечает, вообще говоря, другой линии спектра:

$$\sum = a^2 (l+1). \quad (44)$$

Суммы (43) и (44) пропорциональны «весу» $(2l+1)$ состояния l [ср. т. I, гл. VIII, § 9, где вместо l более общим образом написано J (внутреннее квантовое число)]; мы могли бы также сказать: пропорциональны числу различных сферических функций (ср. § 5, стр. 38) одинакового нижнего индекса l . Появление веса $2l+1$ в сумме интенсивностей всех переходов, которые ведут к состоянию l или которые исходят из него, находится в соответствии с правилами сумм Бургера и Доргело (ср. т. I, гл. 8, § 9). О дальнейших применениях этих формул мы будем говорить в следующей главе.

ГЛАВА II

ЗАДАЧА КЕПЛЕРА

Мы переходим теперь к центральной задаче квантовой механики, задаче об атоме водорода. Именно эта проблема явилась пробным камнем для волномеханического метода в первой работе Шредингера 1926 г. К задаче Кеплера примыкает теория линейчатых спектров, не только спектра водорода, но и других атомов в пренебрежении их мультиплетной структурой. Наряду с этим мы разовьём в этой главе теорию полосатых спектров, насколько это можно сделать, не прибегая к теории возмущений.

§ 1. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ В ДИСКРЕТНОМ СПЕКТРЕ

Потенциальная энергия взаимодействия между электроном и Z -кратно заряженным ядром при обычной нормировке ($V = 0$ для $r = \infty$) равна

$$V = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Волновое уравнение, следовательно, имеет вид:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (1)$$

Мы будем рассматривать его в сферических координатах r, ϑ, φ и искать решение в виде:

$$\psi = RP_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (2)$$

где R есть функция только от r . Нижний индекс l шаровой функции P является целым числом (≥ 0), верхний индекс m — положительным или отрицательным целым числом, причём

$$|m| \leq l, \quad (2a)$$

ср. (I. 3.16a). Если мы используем дифференциальное уравнение для шаровых функций в виде (I.3.16) с собственным значением λ из (I.3.11) и воспользуемся выражением для $\Delta\psi$ из уравнения (1.3.1a), то получим для R дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(A + 2\frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \right) R = 0, \quad (3)$$

где мы ввели обозначения

$$A = \frac{2m}{\hbar^2} W, \quad B = \frac{m}{\hbar^2} Ze^2, \quad C = -l(l+1). \quad (3a)$$

Мы примем в этом параграфе $W < 0$, что соответствует эллиптическим орбитам прежней теории, и положим, чтобы учесть одновременно и знак и размерность A :

$$A = -\frac{1}{r_0^2}. \quad (4)$$

Определим сначала асимптотическое поведение R ; отбрасывая в (3) все члены с $\frac{1}{r}$ и $\frac{1}{r^2}$, получим:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = \frac{R}{r_0^2}, \quad R = e^{\pm \frac{r}{r_0}}.$$

Из этих двух асимптотических решений мы должны взять только то, которое исчезает на бесконечности. Введём безразмерную переменную

$$\rho = 2 \frac{r}{r_0} = 2r \sqrt{-A}, \quad 0 \leq \rho \leq \infty, \quad (4a)$$

и перепишем наше асимптотическое решение в виде

$$R = e^{-\frac{\rho}{2}}.$$

В соответствии с этим мы положим, как обычно,

$$R = e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot v. \quad (5)$$

Умножим уравнение (3) на $\frac{r_0^2}{4}$ и перепишем его через переменную ρ (штрихи означают в дальнейшем дифференцирование по ρ):

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{-A}} \frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (6)$$

Из (5) вычисляем

$$R' = e^{-\frac{\rho}{2}} \left(v' - \frac{1}{2} v \right), \quad R'' = e^{-\frac{\rho}{2}} \left(v'' - v' + \frac{1}{4} v \right).$$

Подставляя эти выражения в (6), получаем дифференциальное уравнение для v :

$$v'' + \left(\frac{2}{\rho} - 1 \right) v' + \left[\left(\frac{B}{\sqrt{-A}} - 1 \right) \frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] v = 0. \quad (7)$$

Единственной особой точкой этого уравнения, лежащей на конечном расстоянии, является граничная точка $\rho = 0$; согласно критерию (1.3.4) она является регулярной особой точкой. Мы положим поэтому

$$v = \rho^\alpha w, \quad w = \sum_{n=0,1,2,\dots} a_n \rho^n. \quad (7a)$$

Чтобы найти характеристический показатель α , подставим (7a) в (7) и найдём коэффициент при $a_0 \rho^{\alpha-2}$:

$$\alpha(\alpha-1) + 2\alpha - l(l+1) = \alpha(\alpha+1) - l(l+1). \quad (7b)$$

Приравнявая этот коэффициент нулю, находим два значения: $\alpha = l$ и $\alpha = -l-1$, из которых мы можем использовать только первое, если хотим, чтобы наше решение было бы собственной функцией задачи¹⁾. Таким образом, мы заменяем (7a) на

$$v = \rho^l w = \sum_{n=0,1,2,\dots} a_n \rho^{n+l}, \quad l > 0. \quad (7b)$$

¹⁾ Ср. также гл. IV, § 8, текст после уравнения (22).

После подстановки в (7) коэффициенты при всех степенях ρ должны обратиться в нуль. Это требование приводит к рекуррентной формуле для коэффициентов a_ν и притом к двучленной формуле. Именно, приравнявая нулю коэффициент при $\rho^{\nu+l-1}$, получаем:

$$\begin{aligned} \{(\nu+l+1)(\nu+l)+2(\nu+l+1)-l(l-1)\} a_{\nu+1} = \\ = \left\{ \nu+l+1 - \frac{B}{\sqrt{-A}} \right\} a_\nu. \end{aligned} \quad (8)$$

Мы хотим теперь добиться, чтобы w превратилось в полином, т. е. чтобы ряд оборвался, скажем, при

$$\nu = n_r, \quad (9)$$

где обозначение n_r должно указывать на «радиальное квантовое число». Это будет иметь место, если обратится в нуль коэффициент при a_ν для $\nu = n_r$, для чего надо положить

$$\frac{B}{\sqrt{-A}} = n_r + l + 1 = n; \quad (9a)$$

тогда обратятся в нуль, естественно, и все следующие коэффициенты a_ν для $\nu > n_r$; n будет «главным квантовым числом». Из (9a) следует теперь, после возвышения в квадрат,

$$-\frac{B^2}{A} = n^2.$$

Но по смыслу постоянных A и B из (3a) это выражение как раз определяет энергию бальмеровского терма:

$$W = W_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (10)$$

Таким образом, дискретный спектр собственных значений в задаче об атоме водорода найден.

Мы могли бы получить этот результат, который является типичным для всей теории линейчатых спектров, и непосредственно из общих формул (9)—(12) дополнения 2. Если мы умножим наше уравнение (7) на ρ^l и сравним с (9) из дополнения 2, то найдём:

$$\left. \begin{aligned} A_2 = 1, \quad B_2 = 0, \quad A_1 = 2, \quad B_1 = -1, \\ A_0 = -l(l+1), \quad B_0 = \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1. \end{aligned} \right\} \quad (10a)$$

Поэтому характеристическое уравнение (10) дополнения 2 примет вид

$$\alpha(\alpha-1) + 2\alpha - l(l+1) = 0 \quad (10б)$$

в соответствии с нашим выражением (7б). Далее, уравнение (12) дополнения 2 приводит к условию обрыва степенного ряда (n заменено на n_r и α на l):

$$-(l+n_r) + \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1 = 0, \quad (10в)$$

что в точности совпадает с нашим уравнением (9a).

Сделаем теперь несколько замечаний относительно соотношений между волновомеханическими квантовыми числами и квантовыми числами старой теории. Старое главное квантовое число n составляется, согласно (9a), из двух целых положительных чисел n_r и l , каждое из которых может пробегать

все значения от нуля до бесконечности; n_r отвечает, как уже упоминалось, «радиальному квантовому числу», l является нашим теперешним «азимутальным квантовым числом», так что $l+1$ равняется прежнему азимутальному квантовому числу n_r . Поэтому для числа n_r волновая механика приводит к возможности всех положительных целых значений за исключением нуля. Это исключение достигалось в старой квантовой теории ценой дополнительного запрета (ср. т. I, гл. VIII). Здесь оно возникает автоматически. Впрочем уже и в прежнем изложении (т. I, гл. VIII) мы должны были перейти в теории аномального эффекта Зеемана от n_r к l (обозначенному там через L), чтобы должным образом представить положение вещей.

Задача Кеплера является в смысле определения, данного на стр. 38, вырожденной, именно, собственному значению W_n принадлежат все собственные функции:

$$\psi = R(\rho) P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi},$$

квантовые числа которых n , l и m удовлетворяют соотношениям [ср. (9a) и (2a)]:

$$l \leq n-1, \quad |m| \leq l. \quad (11)$$

Их общее число будет равно

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2, \quad (11a)$$

иными словами, каждое собственное значение является $(n^2 - 1)$ -кратно вырожденным.

Займемся теперь более подробным исследованием принадлежащих собственным значениям (10) собственных функций. Их радиальная часть, согласно (5) и (7в), равна

$$R = \rho^l \cdot \omega \cdot e^{-\frac{\rho}{2}}, \quad (12)$$

где ω — полином степени n_r , полностью (с точностью до постоянного множителя) определяемый рекуррентной формулой (8). Построим дифференциальное уравнение для ω . Для этого мы вычислим с помощью (7в)

$$\psi' = \rho^l \left(\omega' + \frac{l}{\rho} \omega \right), \quad \psi'' = \rho^l \left(\omega'' + \frac{2l\omega'}{\rho} + \frac{l(l-1)}{\rho^2} \omega \right)$$

и после подстановки в (7) и простых преобразований, в которых используется (9a), получим:

$$\rho \omega'' + [2(l+1) - \rho] \omega' + (n-l-1) \omega = 0. \quad (13)$$

Это уравнение можно получить путём последовательного дифференцирования из более простого уравнения

$$\rho y'' + (1-\rho) y' + ky = 0. \quad (14)$$

Именно, если обозначить l -ю производную от y через ω , то в силу формулы для многократного дифференцирования произведения будет

$$\rho \omega'' + (l+1-\rho) \omega' + (k-l) \omega = 0. \quad (14a)$$

Если мы положим здесь

$$l = 2l + 1, \quad k = n + l,$$

то (14a) перейдёт в (13).

Мы будем называть полиномиальное решение уравнения (14) *полиномом Лагерра* L . Если мы используем для обозначения степени этого полинома нижний индекс, а верхним индексом обозначим число дифференцирований, то решение (13) можно будет записать в виде:

$$w = L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho). \quad (15)$$

Таким образом, степень полинома w будет равна

$$n + l - (2l + 1) = n - l - 1 = n_r$$

в соответствии с (9) и (9а).

Радиальную часть собственной функции можно записать теперь в виде:

$$R = \rho^l L_{n+l}^{(2l+1)} e^{-\frac{\rho}{2}}, \quad (16)$$

а всю собственную функцию, согласно (2), как

$$\psi = N \rho^l L_{n+l}^{(2l+1)} e^{-\frac{\rho}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad N = N_r N_\theta N_\varphi, \quad (17)$$

где мы ввели нормировочный множитель N и расщепили его на множители N_r (который надо определить) и N_θ , N_φ [уже известные из (1.9.23,30)].

Соотношение между ρ и первоначальной переменной r задаётся [ср. (4а), (3а) и (10)] формулой

$$\rho = 2r \frac{me^2 Z}{\hbar^2 n} = 2r \frac{Z}{na}; \quad (18)$$

где a означает, как обычно, радиус первой боровской орбиты, следовательно, $\frac{a}{Z}$ — радиус той же орбиты для Z -кратно заряженного ядра.

Согласно (4а) введённая соотношением (4) длина r_0 в n раз больше последней величины:

$$r_0 = n \frac{a}{Z}. \quad (19)$$

§ 2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И СВОЙСТВА ПОЛИНОМОВ ЛАГЕРРА. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ И НОРМИРОВКА. ВВЕДЕНИЕ ГИПЕРГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ

Начнём с того, что выведем удобное для наших целей представление полиномов Лагерра. Мы утверждаем, что если обозначить снова степень через k , а независимую переменную через ρ , то

$$L_k(\rho) = e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\rho}). \quad (1)$$

Для доказательства положим

$$u = \rho^k e^{-\rho}. \quad (2)$$

Дифференцируя по ρ один раз, находим:

$$\rho u' = (k - \rho) u$$

и поэтому после $(k+1)$ -кратного дифференцирования получаем:

$$\rho u^{(k+1)} + (k+1) u^{(k+1)} = (k - \rho) u^{(k+1)} - (k+1) u^{(k)}. \quad (3)$$

Полагая теперь $L_k = y$ и в согласии с (1) и (2) $x^{(k)} = ye^{-\rho}$ вычисляем:

$$x^{(k+1)} = (y' - y)e^{-\rho}, \quad x^{(k+2)} = (y'' - 2y' + y)e^{-\rho}. \quad (4)$$

Тогда после подстановки в (3) возникает:

$$\rho(y'' - 2y' + y) + (k+1)(y' - y) = (k-\rho)(y' - y) - (k+1)y. \quad (5)$$

После соответствующей перестановки членов это уравнение совпадает с «дифференциальным уравнением Лагерра» (1.14).

Чтобы найти тот член полинома, который обладает наибольшей степенью ρ , надо дифференцировать в (1) один лишь множитель $e^{-\rho}$. Получаем

$$(-1)^k \rho^k. \quad (6)$$

Таким образом, постоянный множитель, который не определялся дифференциальным уравнением Лагерра, фиксируется выбором нашего решения в форме (1).

На рис. 8 представлены графически четыре первых полинома. Общая формула для полиномов Лагерра имеет вид:

$$L_k(\rho) = (-1)^k \left(\rho^k - \frac{k^2}{1!} \rho^{k-1} + \frac{k^2(k-1)^2}{2!} \rho^{k-2} + \dots + (-1)^k k! \right), \quad (7)$$

что легко установить, раскрывая представление (1), или же непосредственно из дифференциального уравнения.

Таким образом, согласно (1.17) и (1) этого параграфа, явное представление собственной функции ψ есть

$$\psi = N \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} \left(e^{\rho} \frac{d^{n+l}}{d\rho^{n+l}} (\rho^{n+l} e^{-\rho}) \right) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (8)$$

Любая пара таких функций связана, согласно (1.7.18), условием ортогональности

$$\int \psi_{nlm} \psi_{n'l'm'}^* d\tau = 0, \quad \text{кроме тех случаев, когда одновременно } n = n', \\ l = l' \text{ и } m = m'. \quad (9)$$

Но как мы уже знаем, выполнение этого требования обеспечено свойствами угловой части волновой функции, если только не имеют места одновременно равенства $m = m'$ и $l = l'$. Чтобы найти вытекающее отсюда условие, налагаемое на радиальную часть, нам надо положить $m' = m$ и $l' = l$. Таким образом, получаем (R действительно по определению) радиальное условие ортогональности:

$$\int R_{nlm} R_{n'l'm} r^2 dr = 0, \quad n' \neq n. \quad (10)$$

Согласно (1.16) это уравнение содержит утверждение относительно свойств полиномов L_{n+l} и $L_{n'+l}$. С другой стороны, полагая $n' = n$, $l' = l$, $m' = m$, мы получим условие нормировки. Учитывая представление (1.17)

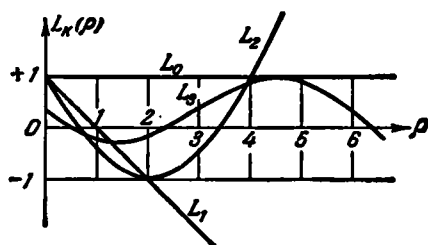


Рис. 8. Первые полиномы Лагерра: $L_0 = 1$, $L_1 = -\rho + 1$, $L_2 = \rho^2 - 4\rho + 2$, $L_3 = -\rho^3 + 9\rho^2 - 18\rho + 6$.

К полиномам L_2 и L_3 на рисунке добавлены множители $\frac{1}{2}$ и $\frac{1}{6(1+\sqrt{3})}$, выбранные так, чтобы главные максимумы (минимумы) L_2 и L_3 стали бы равными ± 1 .

и нормировку угловой части (1.17), находим:

$$N_r^2 \left(\frac{r_0}{2}\right)^3 J = 1, \quad (11)$$

$$J = \int_0^{\infty} \rho^{2(l+1)} e^{-\rho} [L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho)]^2 d\rho. \quad (12)$$

Множитель $\left(\frac{r_0}{2}\right)^3$, который возникает при переходе от r к ρ , обусловлен тем обстоятельством, что наше условие нормировки относится к переменной r , в то время как в интеграл J входит, естественно, переменная интегрирования ρ .

Вычисление J можно провести совершенно аналогично вычислениям, проведённым на стр. 61 и 65; в дополнении 8 мы познакомимся с более общим и менее формальным приёмом. Следуя тому или иному пути, получаем:

$$J = \frac{2\pi (\pi + l)!^2}{(n - l - 1)!}. \quad (13)$$

Тем самым определяется, согласно (11), и нормировочный множитель

$$N_r^2 \left(\frac{r_0}{2}\right)^3 = \frac{(n - l - 1)!}{2\pi [(n + l)!]^2} \quad (14)$$

и, следовательно, если подставить значение r_0 из (1.19),

$$N_r^2 = \left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n - l - 1)!}{2\pi [(n + l)!]^2}. \quad (15)$$

Поэтом, для полного нормировочного множителя N [ср. (1.17)] получается:

$$N^2 = \left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n - l - 1)!}{2\pi [(n + l)!]^2} \cdot \frac{2l + 1 (l - m)!}{4\pi (l + m)!}. \quad (16)$$

Разумно уже здесь обсудить связь полиномов Лагерра со значительно более общей *гипергеометрической функцией*.

Мы начнём с гипергеометрической функции *четырёх аргументов*. Следуя классической работе Гаусса 1812 г., напомним:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (17)$$

Это ряд вырождается в многочлен, если либо α , либо β оказываются целым отрицательным числом; в остальных случаях он определяет трансцендентную функцию.

Вместо ряда эту функцию можно определить её дифференциальным уравнением:

$$x(1-x) \frac{d^2 F}{dx^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x] \frac{dF}{dx} - \alpha\beta F = 0. \quad (18)$$

которое легко получить, исходя из ряда (17).

Между «соседними» F , т. е. отличающимися друг от друга только изменением на единицу одного или нескольких из первых трёх аргументов, существует целый ряд соотношений, из которых не менее двадцати трёх было найдено Гауссом. Некоторые из них, по мере необходимости, будут получены в дальнейшем. В их число попадает и дифференциальное урав-

нение (18) на основании непосредственно получающегося из (17) соотношения

$$\frac{dF}{dx} = \frac{\alpha\beta}{\gamma} F(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1, x). \quad (19)$$

Для нас сейчас большее значение имеет гипергеометрическая функция *трёх аргументов*:

$$F(\alpha, \gamma, \rho) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{\rho}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{\rho^2}{2!} + \dots \quad (20)$$

Она получается из (17) путём предельного перехода

$$\beta \rightarrow \infty, \quad x \rightarrow 0, \quad \beta x = \rho. \quad (21)$$

По этой причине её называют «конфлюэнтной» [вырожденной¹⁾] гипергеометрической функцией. Её дифференциальное уравнение, как легко получить предельным переходом (21) из (18), имеет вид:

$$\rho \frac{d^2 F}{d\rho^2} + (\gamma - \rho) \frac{dF}{d\rho} - \alpha F = 0. \quad (22)$$

Вместо (19) получается соотношение

$$\frac{dF}{d\rho} = \frac{\alpha}{\gamma} F(\alpha + 1, \gamma + 1, \rho). \quad (23)$$

В число функций, представляющихся бесконечным рядом (20), попадают радиальные собственные функции непрерывного спектра водорода (§ 7 и 9). Ряд обрывается (для конфлюэнтной, так же как и для общей гипергеометрической функции), если α оказывается равным целому отрицательному числу, и приводит тогда, вообще говоря, к радиальной собственной функции дискретного спектра, например, релятивистского спектра водорода (гл. IV, § 8) или полосатого спектра двухатомной молекулы (эта глава, § 11). Для рассматриваемого сейчас случая нерелятивистского дискретного спектра водорода нужно не только положить α равным целому отрицательному числу, но и положить γ равным целому положительному числу; тогда F перейдёт в полином Лагерра или его производную.

Начнём со случая $\gamma = 1$, $\alpha = -k$ (k — целое). Тогда (22) совпадёт с дифференциальным уравнением (1.14) для полнома Лагерра степени k . Следовательно,

$$L_k(\rho) = CF(-k, 1, \rho). \quad (24)$$

При обычной нормировке полиномов Лагерра постоянная C равняется k , что непосредственно следует из (7).

Если мы заменим теперь k на целое число $n + l$ и применим к (24) $(2l + 1)$ -кратное дифференцирование по ρ , то, согласно (23), будем иметь:

$$\frac{d^{2l+1} L_{n+l}}{d\rho^{2l+1}} = C' F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho). \quad (25)$$

Мы получаем, следовательно, часть радиальной собственной функции келлеровой задачи, выраженную через полином Лагерра; первый аргумент $-n + l + 1 = -n_r$ [ср. (1.9а)] указывает, что речь идёт о полиноме степени n_r , что мы и требовали в предыдущем параграфе. Согласно (23)

$$C' = C \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!(2l+1)!} = \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1)!(2l+1)!}. \quad (25a)$$

¹⁾ Мы прибегаем к общепринятому обозначению «конфлюэнтная», так как слово «вырожденная» уже используется в ряде других значений.

Через конфлюэнтный гипергеометрический ряд выражаются и полиномы Эрмита. Действительно, сопоставим дифференциальное уравнение (22) с дифференциальным уравнением (1.5.11) для полиномов Эрмита чётной степени $n = 2m$, положив в (22) $\alpha = -m$, $\gamma = \frac{1}{2}$, $\rho = \xi^2$. Таким путём найдём

$$H_{2m}(\xi) = C_m F\left(-m, \frac{1}{2}, \xi^2\right). \quad (26)$$

Для $m = 0, 1, 2$ отсюда следует:

$$H_0(\xi) = C_0, \quad H_2(\xi) = C_2(1 - 2\xi^2),$$

$$H_4(\xi) = C_4\left(1 - 4\xi^2 + \frac{4}{3}\xi^4\right),$$

что, действительно, совпадает с (1.5.13а), если положить $C_0 = 1$, $C_2 = -2$, $C_4 = 12$. Для нечётного $n = 2m - 1$ вместо (26) имеем:

$$H_{2m-1}(\xi) = C'_m \frac{d}{d\xi} F\left(-m, \frac{1}{2}, \xi^2\right). \quad (26a)$$

Шаровые функции также входят в число гипергеометрических функций, однако уже не конфлюэнтных, а общих от четырёх аргументов. Именно, если сравнить (18) и (1.3.2) и положить в последнем $m = 0$, то мы достигнем тождества, если положим в (18):

$$\alpha + \beta = 1, \quad \gamma = 1, \quad x = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) = \frac{1}{2}(1 - \xi).$$

Для обрыва ряда необходимо, чтобы α или β было бы целым отрицательным числом. Положим, например, $\alpha = -l$, следовательно, $\beta = l + 1$. Тогда (18) перейдёт в

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 F}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dF}{d\xi} + l(l+1)F = 0, \quad (27)$$

что с точностью до обозначений совпадает с (1.3.2), если положить там $m = 0$ и заимствовать λ из (1.3.11). Тем самым мы нашли представление шаровых функций Лежандра через оборванный и специализированный гипергеометрический ряд типа (17):

$$P_l(\xi) = F\left(-l, l+1, 1, \frac{1-\xi}{2}\right). \quad (28)$$

Постоянный множитель, который надо ещё было бы добавить в правую часть, равен единице, так как $P_l(1) = 1$.

Из (28) путём последовательного m -кратного дифференцирования по ξ [причём каждый раз используется соотношение (19)] получаем:

$$\frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi) = C F\left(m-l, m+l+1, m+1, \frac{1-\xi}{2}\right),$$

$$C = \frac{(l+m)!}{2^m m! (l-m)!},$$

откуда после умножения на $\sin^m \theta$

$$P_l^m(\xi) = C (1 - \xi^2)^{\frac{m}{2}} F\left(m-l, m+l+1, m+1, \frac{1-\xi}{2}\right). \quad (29)$$

Следовательно, и присоединённые шаровые функции попадают в число оборванных гипергеометрических рядов.

Наконец, в число таких функций можно включить и бесселевы функции как «дважды конфлюэнтные гипергеометрические функции». В (20) мы пришли к «однократно конфлюэнтной функции» F путём предельного перехода

$$\beta \rightarrow \infty, \quad x \rightarrow 0, \quad \beta x \rightarrow \rho.$$

Если мы сделаем теперь в (20) второй предельный переход

$$\alpha \rightarrow \infty, \quad \rho \rightarrow 0, \quad \alpha \rho \rightarrow \sigma$$

и положим, кроме того, $\gamma = n + 1$, где n — необязательно целое, то получим ряд

$$1 + \frac{1}{1!} \frac{\sigma}{n+1} + \frac{1}{2!} \frac{\sigma^2}{(n+1)(n+2)} + \dots$$

Этот ряд совпадёт с рядом (1.3.24), если мы положим $\sigma = -\frac{\rho^2}{4}$. Поэтому мы получаем после добавления имевшегося множителя $\left(\frac{\rho}{2}\right)^n / \Gamma(n+1)$

$$J_n(\rho) = \frac{\left(\frac{\rho}{2}\right)^n}{\Gamma(n+1)} F(\alpha, \beta, \gamma, x), \quad \text{причём} \begin{cases} \alpha \rightarrow \infty, \beta \rightarrow \infty, \\ \alpha \beta x \rightarrow -\frac{\rho^2}{4}, \\ \gamma = n + 1. \end{cases} \quad (30)$$

§ 3. ЧИСЛЕННОЕ И ГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ. СРАВНЕНИЕ С ПРЕЖНИМИ ПРЕДСТАВЛЕНИЯМИ ОБ ОРБИТАХ

Мы соберём в таблицу собственные функции кеплеровой задачи для случая дискретных состояний. Заполнению таблицы мы предположим несколько замечаний.

Из неравенств (1.11) для случая $n = 1$ следует $l = 0, m = 0$ и также $n_r = 0$, так как в силу (1.9а) всегда

$$l + n_r = n - 1. \quad (1)$$

Аналогично для случая $n = 2$ получается: или $l = 0, m = 0, n_r = 1$, или $n_r = 0, l = 1, m = 0$ или ± 1 .

Смысл элементов столбца для P_l^m становится ясным после сравнения с подписями к рис. 1 и 2. Например,

$$P_1^1 = \sin \vartheta \frac{dP_1}{d \cos \vartheta} = \sin \vartheta.$$

Столбец для R выполнен с помощью (1.16) или общего представления (2.8). Так, например, в первой и в последней строках этого столбца стоят

$$R = \rho^0 L_1' e^{-\frac{\rho}{2}} = e^{-\frac{\rho}{2}}$$

и соответственно

$$R = \rho^2 L_2^{(0)} e^{-\frac{\rho}{2}} = \rho^2 (-1)^0 5! e^{-\frac{\rho}{2}} = -120 \rho^2 e^{-\frac{\rho}{2}}.$$

В следующем столбце выписаны вычисленные с помощью (2.16) нормировочные множители N .

В предпоследнем столбце, чтобы иметь не зависящий от ρ масштаб, в качестве независимой переменной выбрано не ρ , а

$$s = Z \frac{r}{a}, \quad (2)$$

n	l	m	n_r	P_l^m	$R(\rho)$	$\left(\frac{a}{Z}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\pi} N$	$\pm \left(\frac{a}{Z}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\pi} \psi_{\text{норм}}$	Уровни и оболочки
1	0	0	0	1	$-e^{-\frac{\rho}{2}}$	1	e^{-s}	1s, K
2	0	0	1	1	$2(\rho-2)e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{8\sqrt{2}}$	$\frac{1}{4\sqrt{2}}(2-s)e^{-\frac{s}{2}}$	2s, L_1
2	1	0	0	$\cos \theta$	$-6\rho e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{24\sqrt{2}}$	$\frac{1}{4\sqrt{2}}se^{-\frac{s}{2}}\cos \theta$	2p, $L_{II}+$ $+L_{III}$
2	1	1	0	$\sin \theta$	$-6\rho e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{48}$	$\frac{1}{8}se^{-\frac{s}{2}}\sin \theta e^{i\varphi}$	
3	0	0	2	1	$-3(\rho^2-6\rho+6)e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{54\sqrt{3}}$	$\frac{1}{81\sqrt{3}}(27-18s+2s^2)e^{-\frac{s}{3}}$	3s, M_1
3	1	0	1	$\cos \theta$	$24\rho(\rho-4)e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{12 \cdot 36\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{2}s}{81}(6-s)e^{-\frac{s}{2}}\cos \theta$	3p, $M_{II}+$ $+M_{III}$
3	1	1	1	$\sin \theta$	$24\rho(\rho-4)e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{24 \cdot 36}$	$\frac{s}{81}(6-s)e^{-\frac{s}{2}}\sin \theta e^{i\varphi}$	
3	2	0	0	$\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}$	$-120\rho^2 e^{-\frac{\rho}{2}}$	$\frac{1}{18 \cdot 120 \cdot \sqrt{6}}$	$\frac{2s^2}{81\sqrt{6}}e^{-\frac{s}{3}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$	3d, $M_{IV}+$ $+M_V$

т. е. r измеряется в боровских радиусах для Z -кратно заряженного ядра. Согласно (1.18) s и ρ связаны соотношением

$$\frac{\rho}{2} = \frac{s}{n} = \begin{cases} s & \text{для } n = 1, \\ \frac{s}{2} & \text{для } n = 2, \\ \frac{s}{3} & \text{для } n = 3. \end{cases} \quad (3)$$

В заголовке этого предпоследнего столбца указано, что к ψ добавлен нормировочный множитель N , исключая $\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}$ и $\pi^{-\frac{1}{2}}$, на произведение которых надо поэтому помножить все строки этого столбца. Знак \pm в заголовке означает, что знак N находится в нашем распоряжении и что надлежащим его выбором мы можем сделать рассматриваемое произведение положительным для $s=0$ или окрестности этой точки.

Последний столбец содержит обычные спектроскопические обозначения термов и их соотношение с замкнутыми атомными оболочками (ср. т. I, гл. IV, табл. 19). Тот факт, что согласно этому последнему столбцу одному водородному состоянию отвечают часто две различные оболочки, связан с тем, что мы пока ещё не учитывали разделение термов, вызванное «спином» электрона.

Рис. 9 представляет радиальную часть собственной функции ψ графически. При его рассмотрении бросается в глаза следующее соотношение,

имеющее чрезвычайно большую общность: число нулей между граничными точками $s = 0$ и $s = \infty$ в точности равно радиальному квантовому числу n_r . Кривые для K , $L_{II} + L_{III}$ и $M_{IV} + M_V$ на рис. 9 не имеют нулей; согласно нашей таблице они отвечают случаю $n_r = 0$. Для L_I и $M_{II} + M_{III}$ имеется по одному нулю; согласно таблице в этих случаях $n_r = 1$, нули расположены при $s = 2$ и $s = 6$. Для M_I в соответствии с $n_r = 2$ возникают два нуля, согласно таблице они находятся из уравнения $2s^3 - 18s + 27 = 0$, следовательно, расположены в точках $s = \frac{3}{2}(3 \pm \sqrt{3})$.

Выскажем общее утверждение: квантовые числа (радиальные, азимутальные и т. д.) означают числа узлов соответствующей собственной функции, которые лежат внутри области изменения соответствующей координаты. Вспомним аналогичное положение вещей для колеблющейся струны, где номер обертона как раз определяется числом узловых точек, лежащих между закреплёнными концами струны.

Общее доказательство этого утверждения проводится следующим образом: пусть P_0, P_1, \dots, P_n — система ортогональных друг другу в интервале (a, b) полиномов степеней $0, 1, \dots, n$, т. е. таких, что для каждого $m < n$ имеет место

$$\int_a^b P_m(x) P_n(x) p(x) dx = 0. \quad (4)$$

Здесь p означает некоторую, не обращающуюся для $a < x < b$ в нуль и, следовательно, могущую считаться положительной, весовую функцию; можно считать, что (4) как раз определяет полиномы P , причём постоянный множитель можно было бы установить, добавляя соответствующее условие нормировки. Предположим теперь, что P_n обладает только $\nu < n$ корнями x_1, x_2, \dots, x_ν , лежащими между a и b , и образуем

$$g_\nu(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_\nu). \quad (5)$$

Тогда $g_\nu(x) P_n(x)$ будет функцией, не меняющей знака в интервале (a, b) , поэтому наверняка

$$\int_a^b g_\nu(x) P_n(x) p(x) dx \neq 0. \quad (6)$$

С другой стороны, g_ν можно получить как линейную комбинацию полиномов P_0, P_1, \dots, P_ν :

$$g_\nu(x) = \sum_0^\nu c_\mu P_\mu. \quad (7)$$

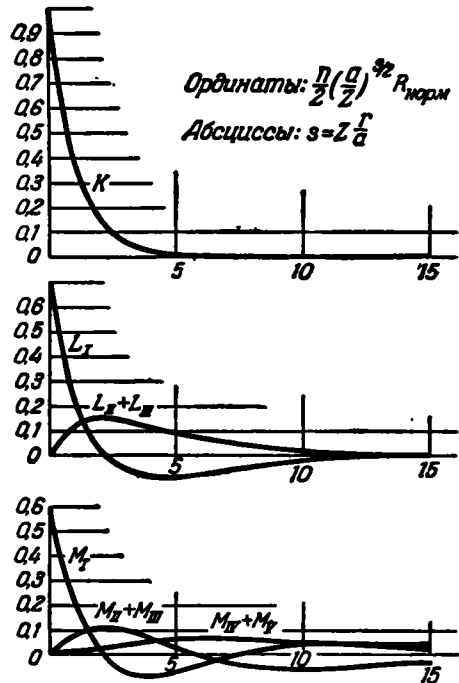


Рис. 9. Кривые нормированной радиальной части ψ , умноженной на $\frac{n}{2} \left(\frac{a}{z}\right)^{\frac{3}{2}}$. Множитель n приводит к тому, что L -кривые получают вдвое большие ординаты, чем следовало бы из нормировки, а M -кривые — втрое большие.

Тогда, однако, в силу (4) левая часть (6) должна быть равна нулю. Поэтому $\nu < n$ невозможно.

Так как возможность $\nu > n$ исключается основной теоремой алгебры, то с необходимостью следует: каждый полином P_n ортогональной в интервале (a, b) системы имеет между a и b точно n корней.

Возвращаясь к кеплеровой задаче, заметим ещё, что в нашем случае присоединённых полиномов Лагерра роль весовой функции p играет

$$p(\rho) = \rho^{2l+2} e^{-\rho},$$

что можно усмотреть, например, из (2.12). Наша теорема распространяется, естественно, и на азимутальное квантовое число l , которое в случае $m = 0$ определяет степень полинома Лежандра P_l . То, что последний обладает между $\cos \vartheta = -1$ и $\cos \vartheta = +1$ как раз l корнями, известно уже давно и видно, например, из рис. 1 на стр. 23: $P_1 = \cos \vartheta$ обращается в нуль один раз, $P_2 = \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2}$ — два раза и т. д.

Перейдём теперь от собственных функций ψ к соответствующим плотностям $\psi\psi^*$, которые мы определили в § 7 гл. I. Займёмся прежде всего общими свойствами симметрии этого распределения зарядов. Для s -термов ($l = 0$) распределение заряда сферически симметрично, т. е. не зависит от ϑ и φ ; для p -, d -, ... термов ($l > 0$) независимо от того, будет ли $m = 0$ или $m \neq 0$, оно аксиально симметрично относительно выделенной (правда, иногда только условно) полярной оси $\vartheta = 0$. По поводу последнего утверждения надо заметить, что оно основано на специальном виде $e^{\pm im\varphi}$ зависимости от φ , при котором $\psi\psi^*$ от φ не зависит; в случае зависимости более общего вида¹⁾

$$ae^{im\varphi} + be^{-im\varphi}$$

место аксиальной симметрии замещает, естественно, аксиальная периодичность. Далее, следует учесть, что направление полярной оси (при отсутствии магнитного поля) физически не выделено, так что рассматриваемая симметрия или периодичность могут иметь место относительно любой оси в пространстве. (Это соответствует пространственно неопределённой ориентации плоскостей орбит в прежней теории.)

Поэтому мы приведём на рис. 10²⁾ не сами плотности, но плотности, уже проинтегрированные по сфере радиуса s :

$$\bar{\rho} = s^2 \iint \psi\psi^* \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = s^2 R_{\text{норм}}^2. \quad (8)$$

Получающиеся кривые поучительны во многих отношениях.

Прежде всего они показывают, сколь далеко простирается «облако заряда», в которое расплывается, согласно Шредингеру, заряд e электрона. То обстоятельство, что $\bar{\rho}$ обращается в нуль для $s = 0$, в то время как на многих кривых рис. 9 ψ имело при $s = 0$ максимум, связано, конечно, с множителем s^2 в (8). От точки $s = 0$ $\bar{\rho}$ возрастает либо непосредственно, либо проходя сначала через меньшие максимумы к главному максимуму, с тем чтобы далее экспоненциально убывать при $s \rightarrow \infty$.

¹⁾ В силу условия нормировки введённые постоянные a и b связаны соотношением

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

²⁾ Эти графики, равно как и графики рис. 9, заимствованы в основном из работы Паулинга: L. Pauling, Proc. Roy. Soc. 114, 181 (1927).

Для каждого такого распределения мы можем определить шар среднего радиуса s_m , так что поверхность этого шара будет делить полный заряд на две одинаковые части. На рис. 10 в соответствующих точках проведены ординаты, они всегда оказываются расположенными вблизи главного максимума. Если условно назвать это s_m радиусом оболочки, то мы увидим, что радиус K -оболочки наименьший, оба радиуса L -оболочки больше, а радиусы M -оболочек ещё больше в полном соответствии с прежними представлениями о строении оболочек.

Особенно просто сопоставляются с настоящей картиной прежние круговые орбиты. Эти круговые орбиты отличаются значением $n_r = 0$, следовательно, в приведённой таблице им отвечают оболочки K , $L_{II} + L_{IV}$,

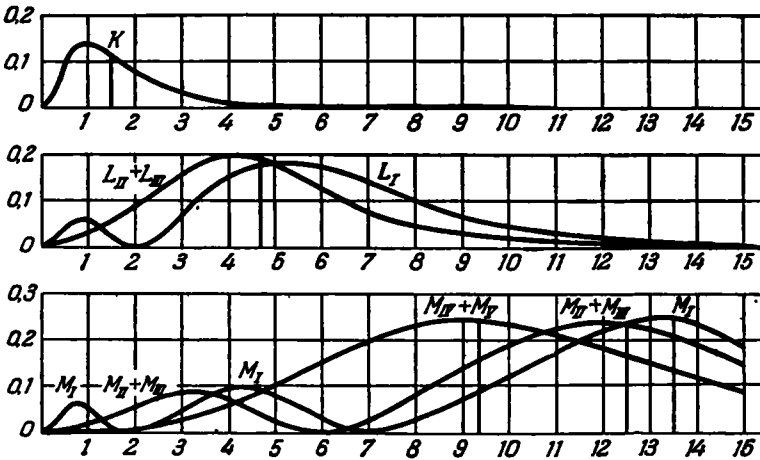


Рис. 10. Наглядное представление распределения плотности в различных собственных состояниях. По оси ординат отложены значения $s^2 f^2$, где F имеет то же значение, что и на рис. 9. Поэтому L -кривые завышены вчетверо (ср. подпись под рис. 9), а M -кривые — в десять раз.

$M_{IV} + M_V, \dots$ Соответствующие кривые на рис. 10 обладают одним единственным максимумом в точках $s = 1$ или $s = 4$, или $s = 9, \dots$ Эти радиусы в точности совпадают с радиусами круговых орбит прежней теории.

§ 4. УЧЁТ ДВИЖЕНИЯ ЯДРА

До сих пор мы рассматривали задачу Кеплера как задачу одного тела; теперь нам надлежит перейти к рассмотрению соответствующей задачи двух тел. Для этого мы, следуя гл. I, § 6, Д, должны ввести конфигурационное пространство шести измерений: пространство координат x_1, y_1, z_1 электрона и x_2, y_2, z_2 ядра, из которых составляются координаты ξ, η, ζ центра инерции и относительные координаты x, y, z . Как мы сейчас покажем, полная волновая функция Ψ задачи распадется на произведение волновых функций ψ «относительного движения» и χ — «движения центра инерции»:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) &= \psi(x, y, z) \chi(\xi, \eta, \zeta), \\ x &= x_1 - x_2, \dots, (m_1 + m_2) \xi = m_1 x_1 + m_2 x_2, \dots \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где мы обозначили массы электрона и ядра через m_1 и m_2 . Для ψ будет иметь место дифференциальное уравнение (1.6.13); существенно, что появляющаяся в нём потенциальная энергия $V = -\frac{e^2}{r}$ зависит только от относительных координат x, y, z . Исходя из

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi}; \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi},$$

получаем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} &= \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \chi + \frac{2}{m_1 + m_2} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \frac{m_1}{(m_1 + m_2)^2} \psi \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2}, \\ \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_2^2} &= \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \chi - \frac{2}{m_1 + m_2} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \frac{m_2}{(m_1 + m_2)^2} \psi \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2}. \end{aligned}$$

При сложении этих выражений средние члены правой части выпадут, и мы получим, следуя обозначениям (1.6.13):

$$\sum_i \frac{1}{m_i} \Delta_i \psi = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \chi \Delta \psi + \frac{1}{m_1 + m_2} \psi \Delta \chi. \quad (2)$$

Вводя сокращения:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad M = m_1 + m_2, \quad (3)$$

мы получим из (2) дифференциальное уравнение для нашей задачи двух тел

$$\frac{1}{2m} \chi \Delta \psi + \frac{1}{2M} \psi \Delta \chi + \frac{1}{\hbar^2} (W - V) \psi \chi = 0, \quad (4)$$

где первый оператор Δ действует на относительные координаты x, y, z , а второй оператор Δ — на координаты центра инерции ξ, η, ζ .

Теперь разделение ψ и χ проходит совершенно просто. Если мы представим себе это уравнение поделённым на $\psi \chi$, то координаты ξ, η, ζ будут содержаться лишь в среднем члене. Следовательно, этот член должен быть равен постоянной. Обозначая эту постоянную через $-\frac{\hbar^2}{2M}$ и определив другую постоянную W_ξ с помощью уравнения

$$W_\xi = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad (5)$$

получим:

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial \zeta^2} + k^2 \chi = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - W_\xi + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (7)$$

Уравнение (6) является волновым уравнением для свободной материальной точки. Оно отличается от (1.2.1) лишь тем, что «масса частицы» m заменена на «массу центра инерции» $M = m_1 + m_2$. Величина k означает здесь волновое число для движения центра инерции и остаётся неопределённой в силу произвола в выборе системы отсчёта. С другой стороны, (7) совпадает с уравнением (1.1) этой главы с точностью до замены W на $W - W_\xi$. Вследствие этого всё, что мы вывели относительно собственных значений и собственных функций, переносится с задачи одного тела на задачу двух

тел; в частности, сохраняется спектральное уравнение (1.10) с точностью до замены W на $W - W_2$ и прежней массы электрона m на определённую в (3) «приведённую» массу m . Первое обстоятельство не оказывает никакого влияния на расположение спектральных линий и означает лишь иную нормировку бальмеровских термов; при образовании разностей между термами константа W_2 выпадает. Напротив, второе обстоятельство проявляется в изменении значения постоянной Ридберга R :

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} = \frac{m_1}{1 + \frac{m_1}{m_2}} \frac{e^4}{2\hbar^3}. \quad (8)$$

Здесь достаточно лишь указать на блестящее подтверждение этой формулы спектроскопическими данными (через малые разности длин волн линий серий Бальмера и Пикеринга, т. I, гл. II). Новая теория объясняет эти разности столь же хорошо и теми же самыми формулами, что и старая.

Однако физическая трактовка этого эффекта не является теперь столь же наглядной, как и ранее. Мы не можем более говорить об электроны и ядре, расположенных в точках орбиты на противоположных концах диаметра, проведенного через центр тяжести. И все же не может быть сомнения, что наш новый результат основывается, как и прежний, на теореме механики о центре инерции. Она сохраняет свою силу и в микромеханике, хотя относится теперь уже не к материальным точкам, а к непрерывному распределению масс (ср. гл. III, § 2).

Мы ответим ещё на вопрос о том, какое облако заряда следует приписать ядру в задаче двух тел (то, что облако заряда электрона по отношению к ядру должно в существенных чертах остаться тем же, что и в задаче одного тела, следует из волнового уравнения (7), которое имеет по существу старую форму). Для выяснения этого обстоятельства мы используем правило, даваемое уравнением (1.7.24), которое определяет относящееся к каждой отдельной заряженной точке распределение заряда в случае наличия многих таких точек. Это правило, специализированное для нашего случая двух материальных точек, гласило: оставляя координаты x_2, y_2, z_2 ядра постоянными, надо проинтегрировать норму собственной функции Ψ по всем возможным значениям координат электрона x_1, y_1, z_1 . Если умножить получающуюся величину на e , мы получим плотность ρ_2 заряда ядра в точке x_2, y_2, z_2 . В нашем случае это приводит, в силу (1), к

$$\begin{aligned} \rho_2 &= e \int \int \int dx_1 dy_1 dz_1 |\Psi|^2 = \\ &= e \int \int \int dx_1 dy_1 dz_1 |\psi(x, y, z)|^2 |\chi(\xi, \eta, \zeta)|^2. \end{aligned} \quad (9)$$

но функция $\chi(\xi, \eta, \zeta)$ является экспонентой типа (1.2.5), поэтому $|\chi(\xi, \eta, \zeta)|^2$ оказывается постоянной, которую можно вынести за знак интеграла. Далее, мы можем ввести вместо x_1, \dots в качестве переменных интегрирования $x = x_1 - x_2, \dots$, т. е. написать вместо (9)

$$\rho_2 = e |\chi(\xi, \eta, \zeta)|^2 \int \int \int dx dy dz |\psi|^2.$$

Оставшийся интеграл равен единице в силу условия нормировки. Поэтому мы получаем:

$$\rho_2 = e |\chi(\xi, \eta, \zeta)|^2 = \text{const.}$$

Облако заряда ядра равномерно распределено во всём бесконечном пространстве, и при этом, естественно, с плотностью, равной нулю, так как надлежит потребовать, чтобы

$$\int \rho_2 d\tau = e.$$

§ 5. ПРАВИЛА ОТБОРА И ИНТЕНСИВНОСТИ В ЗАДАЧЕ КЕПЛЕРА

До сих пор мы рассматривали только отдельные состояния водородного атома; обратимся теперь к переходам между двумя состояниями, следовательно, будем комбинировать пары свободных функций. Так как в кеплеровской задаче мы имеем дело с тремя степенями свободы, то мы будем обозначать эти собственные функции как:

$$\psi_{nlm} \text{ и } \psi_{n'l'm'}.$$

Матричные элементы координаты (электрические моменты M) зависят поэтому от шести квантовых чисел. Мы используем удобный способ записи (1.8.76) и объединим координаты x и y в комплексные числа $x + jy$, $j = \pm i$. Получим:

$$\left. \begin{aligned} (nlm | x + jy | n'l'm') &= \int r \sin \vartheta e^{j\varphi} \psi_{nlm} \psi_{n'l'm'}^* d\tau, \\ (nlm | z | n'l'm') &= \int r \cos \vartheta \psi_{nlm} \psi_{n'l'm'}^* d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Ради полноты следует заметить, что дифференциальное уравнение кеплеровой задачи является самосопряжённым и что поэтому сопряжённая к $\psi_{n'l'm'}$ собственная функция, которую нам надо было бы использовать согласно § 7 гл. I, совпадает с комплексно-сопряжённой ψ^* .

Интегралы (1) можно расщепить на множители, зависящие только от r и только от угловых переменных ϑ , φ . Последние в точности совпадают в обоих интегралах с рассмотренными в (1.9.33) матричными элементами ротатора

$$(\xi + j\eta)_{lm, l'm'} \text{ или } \zeta_{lm, l'm'}.$$

В силу этого мы можем сразу же получить относящиеся сюда правила отбора из уравнений (34) и (35) § 9 гл. I. Разрешёнными являются лишь следующие переходы:

$$l \rightarrow l \pm 1, \quad (2)$$

$$m \begin{cases} \nearrow m \\ \searrow m \pm 1 \end{cases} \quad (2a)$$

Здесь (2) представляет собой правило отбора для азимутального квантового числа, определяющее всю теорию спектральных серий, (2a) — правило отбора для экваториального или магнитного квантового числа, которое становится существенным, когда линия расщепляется в магнитном поле. При этом всегда, как уже было показано на стр. 67, переход $m \rightarrow m$ относится к z -компоненте матричного элемента, а переходы $m \rightarrow m \pm 1$ — к $x \pm iy$ -компонентам.

Что же касается радиальной части, то она оказывается в обоих выражениях (1) одинаковой; мы обозначим её как

$$(nl | r | n'l') = \int_0^{\infty} r^3 R_{nl} R_{n'l'} dr. \quad (3)$$

Величины R определены здесь соотношением (1.16), следовательно, не зависят от m или m' , что находит своё выражение в записи R_{nl} и аналогичной записи для всего матричного элемента (3). Согласно (2) для l' надо рассматривать лишь два значения $l' = l \pm 1$. Спрашивается, существует ли для радиальной части правило отбора, которое ограничивает изменение при переходах квантового числа n , или, что то же самое, главного квантового числа n . Мы знаем, что таких правил отбора нет, иначе не существовало бы спектральных серий. Попытаемся, однако, вывести это утверждение из вида выражения (3).

Согласно (3.3) аргументы ρ и ρ' функций R_{nl} и $R_{n'l'}$ сами зависят от n или n' ; именно они равны:

$$\frac{2}{n} s \quad \text{или} \quad \frac{2}{n'} s; \quad s = Z \frac{r}{a}. \quad (4)$$

Поэтому с учётом представления (1.16) формула (3) даёт

$$\left. \begin{aligned} (nl | r | n'l') &= CS, \quad C = \left(\frac{a}{Z}\right)^4 \left(\frac{2}{n}\right)^l \left(\frac{2}{n'}\right)^{l'} \\ S &= \int_0^\infty s^{l+l'+3} L_{n+i}^{(2l+1)} \left(\frac{2}{n} s\right) L_{n'+i'}^{(2l'+1)} \left(\frac{2}{n'} s\right) e^{-\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}\right)s} ds. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Если бы существовало правило отбора, то оно должно было бы получиться из соотношения ортогональности радиальных собственных функций. В силу (2.10) это соотношение при использовании одной и той же переменной интегрирования s гласит:

$$\int_0^\infty s^{2l+2} L_{n+i}^{(2l+1)} \left(\frac{2}{n} s\right) L_{n'+i'}^{(2l'+1)} \left(\frac{2}{n'} s\right) e^{-\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}\right)s} ds = 0. \quad (6)$$

Однако (5) никак нельзя свести к (6), даже если положить $l' = l$ (что, впрочем, запрещено азимутальным правилом отбора). Таким образом, здесь условие ортогональности изменяет нам и не даёт в качестве следствия никакого правила отбора.

Только что описанное положение вещей ватрудняет и общее вычисление интенсивностей. Мы ограничимся поэтому простейшими случаями, сериями Лаймана и Бальмера.

а) Для *серии Лаймана* в конечном состоянии $n = 1$, следовательно, наверняка $l = 0$. В начальном состоянии n' произвольно, но, в силу (2), $l' = 1$. Мы имеем, следовательно,

$$\left. \begin{aligned} L_{n+i}^{(2l+1)} \left(\frac{2}{n} s\right) &= L_1'(2s) = -i \quad (\text{ср. рис. 8}), \\ L_{n'+i'}^{(2l'+1)} \left(\frac{2}{n'} s\right) &= L_{n'+1}'' \left(\frac{2}{n'} s\right). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Далее, если выбрать в (5) $\frac{2s}{n'} = x$ в качестве новой переменной интегрирования и опускать в дальнейшем штрих у n' , то из (5) получится:

$$S = -\left(\frac{n}{2}\right)^5 \int_0^\infty x^4 L_{n+1}'''(x) e^{-\frac{n+1}{2}x} dx. \quad (8)$$

Для вычисления этого интеграла используем искусственный приём. Заменим временно в экспоненте $\frac{n+1}{2}$ на произвольное число α и напишем:

$$S = -\left(\frac{n}{2}\right)^5 \frac{d^4}{d\alpha^4} S_1, \quad S_1 = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} \frac{d^3}{dx^3} L_{n+1}(x) dx. \quad (9)$$

Трёхкратное интегрирование по частям, в ходе которого мы можем опускать проинтегрированные члены, так как они всё равно пропадут при последующем дифференцировании по α , преобразует это выражение в

$$S_1 = \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} L_{n+1}(x) dx; \quad (10)$$

учитывая представление (2.1), получаем отсюда

$$S_1 = \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-(\alpha-1)x} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} (x^{n+1} e^{-x}) dx. \quad (11)$$

Дальнейшие интегрирования по частям дают

$$S_1 = \alpha^3 (\alpha-1)^{n+1} \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} x^{n+1} dx.$$

Если ввести теперь $y = \alpha x$ в качестве новой переменной интегрирования, то получается:

$$S_1 = \frac{(\alpha-1)^{n+1}}{\alpha^{n-1}} \int_0^{\infty} e^{-y} y^{n+1} dy = \frac{(\alpha-1)^{n+1}}{\alpha^{n-1}} (n+1)! \quad (12)$$

и, следовательно, согласно (9),

$$S = -\left(\frac{n}{2}\right)^5 (n+1)! \frac{d^4 A}{d\alpha^4}, \quad A = \frac{(\alpha-1)^{n+1}}{\alpha^{n-1}}. \quad (13)$$

Дифференцирование A по α будем выполнять последовательно. После трёхкратного дифференцирования получим:

$$A^{\text{III}} = \frac{(n+1)n(n-1)}{\alpha^4} \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^{n-3},$$

откуда после ещё одного дифференцирования возникает

$$A^{\text{IV}} = \frac{(n+1)!}{(n-2)!} \frac{\left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^{n-3}}{\alpha^5} (n+2-4\alpha);$$

если подставить теперь сюда $\alpha = \frac{n+1}{2}$, то получится:

$$A^{\text{IV}} = -2^6 n \frac{(n+1)!(n-1)^{n-3}}{(n-2)!(n+1)^{n+3}}$$

и, следовательно, в силу (13),

$$S = 2n^6 \frac{[(n+1)!]^3 (n-1)^{n-3}}{(n-2)! (n+1)^{n+3}}. \quad (14)$$

Величина C из (5) будет в нашем случае ($n = 1$, $l = 0$ и $n' = n$, $l' = 1$) равна

$$C = \left(\frac{a}{Z}\right)^4 \frac{2}{n}. \quad (15)$$

Следовательно, согласно (4),

$$(1, 0 | r | n, 1) = 4n^5 \left(\frac{a}{Z}\right)^4 \frac{[(n+1)!]^3 (n-1)^{n-3}}{(n-2)! (n+1)^{n+3}}. \quad (16)$$

К этой радиальной части матричного элемента мы должны добавить, с одной стороны, угловую часть и, с другой стороны, нормировочные множители начального и конечного состояний. Рассмотрим например, z -компоненту матричного элемента [вторую строку (1)], так как мы можем предвидеть, что x - и y -компоненты должны привести к тому же конечному результату. Что касается магнитных квантовых чисел m и m' , то в конечном состоянии мы обязаны положить $m = 0$, поскольку $l = 0$, а в начальном состоянии, в котором было $l' = 1$, мы также должны выбрать $m' = 0$, поскольку для $m' = \pm 1$ z -компонента матричного элемента обратилась бы в нуль. Следовательно, угловая часть составит

$$\int d\varphi \int \cos \vartheta P_0(\cos \vartheta) P_1(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{3}. \quad (17)$$

Нам надо ещё определить нормировочные множители по (2.16). Это соотношение даёт:

для конечного состояния с $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$

$$N_{1,0,0}^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^3;$$

для начального состояния с $n' = n$, $l' = 1$, $m' = 0$

$$N_{n,1,0}^2 = \frac{3}{\pi} \left(\frac{Z}{an}\right)^3 \frac{(n-2)!}{n[(n+1)!]^3},$$

благодаря чему

$$N_{1,0,0} N_{n,1,0} = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^3 \sqrt{\frac{(n-2)!}{(n+1)!}} \frac{1}{n^2(n+1)!}. \quad (18)$$

Перемножая теперь (17), (18) и (16) и возводя результат в квадрат, получаем:

$$M_z^2 = \frac{256}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^3 n^6 \frac{(n+1)! (n-1)^{2n-6}}{(n-2)! (n+1)^{2n+6}} = \frac{256}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^2 n^7 \frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}. \quad (19)$$

Для того чтобы получить отсюда интенсивность J излучения, мы должны, согласно (1) примечания на стр. 53, добавить ещё множитель $\frac{e^2}{4\pi c^3 r^2}$ и удвоить результат, так как излучение в каждом направлении происходит за счёт двух нормальных этому направлению составляющих момента M , которые равны между собой и равны M_z . Значение $|\ddot{M}|^2$ надо при этом брать из (1.8.6а); для разности частот $\omega_n - \omega_m$ мы будем в дальнейшем писать ω . Таким образом, получаем:

$$J = \frac{e^2 \omega^4 M_z^2}{\pi c^3 r^2}. \quad (20)$$

Для n -й линии серии Лаймана

$$r = R \left(1 - \frac{1}{n^2} \right),$$

следовательно,

$$\omega = 2\pi cR = 2\pi cR \frac{(n-1)(n+1)}{n^2}. \quad (21)$$

Для интенсивности отсюда получается:

$$J = K \frac{(n-1)^{2n-1}}{n(n+1)^{2n+1}}; \quad K = \frac{256}{3} \left(\frac{ea}{Z} \right)^2 \frac{(2\pi cR)^4}{\pi c^3 r^2}. \quad (22)$$

Асимптотически для $n \rightarrow \infty$ это даёт

$$J \sim \frac{1}{n^3} \quad (23)$$

— результат, который можно получить для любой серии, исходя из принципа соответствия.

б) Для *серии Бальмера* в конечном состоянии $n = 2$ и $l = 0$ или 1. В первом случае согласно правилам отбора (1) для начального состояния $l' = 1$, во втором случае может быть либо $l' = 2$, либо $l' = 0$. Мы получаем, следовательно, три серии переходов, которые носят в общей теории спектральных серий названия главной, первой и второй побочных серий:

$n = 2, l = 0$	$n = 2, l = 1$	$n = 2, l = 1$
$n' > 2, l' = 1$	$n' > 2, l' = 2$	$n' > 2, l' = 0$
$n'p \rightarrow 2s$	$n'd \rightarrow 2p$	$n's \rightarrow 2p$
главная серия	1-я побочная серия	2-я побочная серия

Здесь также оказывается возможным провести вычисление интенсивностей с помощью использованного для серии Лаймана приёма; однако сами выкладки оказываются несколько более сложными. Мы приведём только результаты, причём опять будем писать n вместо n' :

1. Главная серия $J = K \frac{4(n^2-1)(n-2)^{2n-2}}{n(n+2)^{2n+2}},$
2. 1-я побочная серия $J = K \frac{32n(n^2-1)(n-2)^{2n-3}}{3(n+2)^{2n+3}},$
3. 2-я побочная серия $J = K \frac{n(n-2)^{2n-2}}{3(n+2)^{2n+2}}.$

Для суммы всех серий (неразрешённая тонкая структура) получается:

$$1. + 2. + 3. \quad J = K \frac{(n-2)^{2n-3}}{n(n+2)^{2n+2}} (15n^4 - 32n^3 + 16).$$

Формулы для лаймановской и просуммированной бальмеровской серии были вычислены впервые Паули и опубликованы Шредингером ¹⁾ одновременно с общим исследованием о разложении матричных элементов в ряды. Сугиура ²⁾ дополнил вычисления и распространил их на серию Пашена

¹⁾ В конце III сообщения, *Ann. d. Phys.*, 80, 437 (1926).

²⁾ Y. Sugiura, *Journ. de Phys.*, 8, 113 (1927).

$R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$. Общую формулу для перехода $n, l \rightarrow n', l-1$ получил Гордон¹⁾ в виде гипергеометрических рядов. Численные расчёты для частных бальмеровских серий и большого числа линий высших серий выполнил Куппер²⁾. Знание интенсивностей для отдельных серий необходимо для того, чтобы можно было бы проводить сравнение с лучше поддающимися наблюдению сериями щелочных металлов. Измерение поглощения в главной серии щелочных металлов и их теоретическое обсуждение проведено в работе Трумпи³⁾. Для водорода согласие между измерениями и теорией менее удовлетворительно по экспериментальным причинам⁴⁾.

§ 6. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА. ДИА- И ПАРАМАГНЕТИЗМ

Нормальный эффект Зеемана в том виде, как он был впервые теоретически обоснован Лоренцем, проявляется, по нашим теперешним представлениям, только у действительно синглетных линий. Такими являются переходы между двумя состояниями, в каждом из которых результирующий электронный спин скомпенсирован до нуля (ср. т. I, гл. VI, § 4). Пример: парагелий — два электрона с противоположно направленными спинами. Линии водорода, для которых ранее предполагалось существование нормального эффекта Зеемана, обнаруживают в слабых магнитных полях аномальный эффект Зеемана, аналогичный имеющему место у щелочных металлов; только в сильных магнитных полях картина приближается (благодаря эффекту Пашена — Бака, т. I, гл. VIII, § 7) к типу, соответствующему нормальному эффекту Зеемана. Ясно, что если мы будем рассматривать эффект Зеемана в водороде по теории Шредингера, которая вовсе не знает спина, то мы сможем, конечно, получить для любых магнитных полей только нормальный эффект Зеемана. Это мы и хотим сделать ниже. В конце параграфа мы увидим, как можно перейти от одноэлектронной задачи, игнорирующей спин, к многоэлектронной задаче о синглетных линиях, составляющей собственно ту область, в которой полученные формулы имеют смысл. Что же касается реально наблюдаемого эффекта Зеемана в водороде и в щелочных металлах, то тут мы должны будем сослаться на теорию Дирака, в особенности на § 9 гл. V.

Волномеханическое рассмотрение нормального эффекта Зеемана основывается на (1.6.5а). Это уравнение учитывает влияние магнитного поля членом ($A \text{ grad } \psi$). В случае однородного магнитного поля, параллельного оси z , мы положим:

$$A_x = -\frac{1}{2}Hy, \quad A_y = \frac{1}{2}Hx, \quad A_z = 0. \quad (1)$$

Действительно, тогда по формуле $H = \text{rot } A$ будет

$$H_x = H_y = 0, \quad H_z = H.$$

Исходя из (1), получаем:

$$A \text{ grad } \psi = \frac{H}{2} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (2)$$

1) W. Gordon, Ann. d. Phys. 2, 1031 (1929); ср. также P. S. Epstein, Nat. Ac. 12, ноябрь (1926) и L. M. McLean, Phil. Mag. 18, 845 (1934).

2) A. Kupper, Diss. München, Ann. d. Phys. 86, 511 (1928), поправки у L. R. Maxwell, Phys. Rev. 38, 1664 (1931); ср. также F. G. Slack, там же 31, 527 (1928) и H. Bethe, Handb. d. Phys. 24, 1, стр. 442 и сл.

3) В. Трумпи, Zs. f. Phys. 42, 327 (1927); 44, 575 (1927).

4) Литературные ссылки см. в цит. работе Бете, стр. 460 и сл.

Но стоящая в скобках величина оказывается, после введения полярных координат r, ϑ, φ , равной $\frac{\partial \psi}{\partial \varphi}$, что легко проверяется вычислением ¹⁾. Следовательно,

$$(A \operatorname{grad} \psi) = \frac{H}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi},$$

и (1.6.5а) переходит в

$$\Delta \psi - \frac{ie}{\hbar c} H \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0. \quad (3)$$

Мы пишем здесь для массы электрона букву μ , чтобы избежать смещения с магнитным квантовым числом m . Будем искать решение в виде (пригодном не только для кулоновского, но и для любого сферически-симметричного потенциала V):

$$\psi = RP_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (4)$$

Экспоненциальная форма зависимости от φ является здесь необходимой, а не диктуется, как в задаче Кеплера без магнитного поля, одними лишь соображениями удобства. Действительно, из-за присутствия члена $\frac{\partial \psi}{\partial \varphi}$ мы вообще не смогли бы разделить переменные в (3), если написали бы $\begin{Bmatrix} \cos \\ \sin \end{Bmatrix} m\varphi$ вместо $e^{im\varphi}$.

Мы впервые сталкиваемся здесь с таким примером, когда комплексность ψ обуславливается природой задачи.

Если подставить (4) в (3), то получим для ψ дифференциальное уравнение

$$\Delta \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ W + \frac{\hbar e H}{2\mu c} m - V \right\} \psi = 0. \quad (5)$$

Это уравнение примет обычный вид уравнения Шредингера, если мы сделаем в нём подстановку:

$$W + \frac{\hbar e H}{2\mu c} m = W_0; \quad (6)$$

W_0 означает энергию для рассматриваемой задачи без магнитного поля. Поэтому мы можем сразу перенести все результаты § 1 относительно собственных значений и собственных функций: состояния с магнитным полем и в его отсутствие отличаются друг от друга только значением энергии, но не видом собственных функций. Это утверждение составляет волномеханическую аналогию теоремы Лармора. Если мы введём ещё и частоту ларморовой прецессии [ср. т. I, гл. VI, § 4, уравнение (2)]:

$$\omega_L = \frac{|e| H}{2\mu c}, \quad (7)$$

то (6) сведется к утверждению ²⁾:

$$W = W_0 + \hbar \omega_L m. \quad (8)$$

¹⁾ Как специальный случай гораздо более общих вычислений [уравнение (16) дополнения 12].

²⁾ Следует иметь в виду, что в предыдущих уравнениях (3) — (6) под e надо понимать заряд электрона вместе с его отрицательным знаком. Это вытекает из гл. I, § 6Б и, в особенности, из дополнения 3. В отличие от этого $|e|$ в (7) означает только численную величину заряда электрона.

От пространственной ψ -функции (4) мы перейдем к пространственно-временной функции u , умножая первую на

$$e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{W}{\hbar} = \frac{W_0}{\hbar} + \omega_L m, \quad (9)$$

где отрицательный знак перед t соответствует отрицательному знаку перед t в (3) (ср. стр. 44). Мы получаем, таким образом,

$$u = RP_i^m (\cos \theta) e^{i(m\varphi - \omega t)}. \quad (10)$$

Поэтому полученное состояние можно охарактеризовать как круговое колебание, совершаемое вокруг направления магнитных силовых линий. Фаза колебаний равна $m\varphi - \omega t$, следовательно, фазовая скорость составляет

$$a = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{\omega}{m}. \quad (11)$$

Мы знаем, однако (ср., например, стр. 18), что фазовая скорость является вспомогательной величиной и зависит от выбранной нормировки энергии. Поэтому мы перейдем к групповой скорости.

Если сравнить наше выражение (10) для распространяющейся шаровой волны с выражением (1.2.10) для распространяющейся плоской волны, то мы заметим, что m появляется на месте прежнего волнового числа k . В самом деле, m представляет собой число волн, приходящихся на угол 2π , в то время как k означает число волн, приходящихся на длину 2π . Поэтому, если мы хотим вычислить относящуюся к фазовой скорости a групповую скорость b , то нам надо образовать, согласно (1.2.14),

$$b = \frac{d\omega}{dm}.$$

Стоящую в правой части производную надлежит получить, исходя из уравнения (9), которое даёт закон дисперсии нашей круговой волны, т. е. зависимость частоты от «волнового числа» m . Так как W_0 не зависит от m , то эта зависимость приводит к

$$b = \frac{d\omega}{dm} = \omega_L. \quad (12)$$

или словами: групповая скорость круговой волны равна хорошо известной угловой скорости ларморовой прецессии. Представляется заманчивым, как и в случае плоской волны в гл. I, перейти от групповой скорости к заключению относительно движения магнетона, т. е. принять, что ларморову прецессию можно и теперь трактовать как вращение электронов. Мы ещё вернемся к этому вопросу после уравнения (20).

Пока же нам надо устранить с нашего пути определенную трудность. Мы дифференцировали в (12) по квантовому числу m , как если бы речь шла о непрерывно меняющейся величине, в то время как требование однозначности ψ устанавливает целочисленность m . Для разрешения этого противоречия нам придется заимствовать некоторые результаты общего рассмотрения следующей главы. Мы покажем там, что если энергия как собственное значение точно определена, то временная координата электрона и представление об орбитах становятся неопределенными. Если же, наоборот, мы хотим узнать что-либо об обращении электронов, то мы должны отказаться от точного определения энергии. Согласно (8) m выходит в энергию W ; когда мы непрерывно меняем m , то меняется непрерывно и W . Это является

необходимым для того, чтобы мы вообще могли бы говорить о групповой скорости как скорости обращения электрона. Мы видим, таким образом, что казалось бы недопустимое дифференцирование по m находится в связи с обсуждаемым в гл. III «соотношением неточностей».

Впрочем, та же самая трудность появляется уже и для прямолинейного движения электрона. Действительно, следуя де Бройлю, скорость v электрона получается и здесь дифференцированием по длине волны λ (или по обратной величине, волновому числу k). При этом λ может пробегать непрерывный ряд значений, лишь пока мы рассматриваем электрон в неограниченном пространстве; если мы будем мыслить электрон заключённым в некотором объёме, то λ должна пробегать дискретные значения аналогично m в случае эффекта Зеемана. Следовательно, введение понятия групповой скорости v требует и в этом случае отказа от дискретности спектра и приводит к необходимости приписать длине волны λ , так же как и m , возможность непрерывного изменения.

Мы можем теперь легко показать, что наше волномеханическое рассмотрение нормального эффекта Зеемана содержит все результаты, которые мы вывели в § 4 гл. VI т. I из прежней теории. Согласно (8) добавочная магнитная энергия даётся выражением

$$\Delta W = W - W_0 = \hbar \omega_L m, \quad (13)$$

что (отвлекаясь от небольшого изменения обозначений) совпадает с уравнением (22) в § 4 гл. VI т. I. Беря разность между энергиями начального состояния 1 и конечного состояния 2, мы получаем изменение частоты в магнитном поле (с помощью условия частот)

$$\Delta \nu = \frac{\Delta W_1 - \Delta W_2}{h} = \frac{m_1 - m_2}{2\pi} \omega_L,$$

или, учитывая (7),

$$\Delta \nu = (m_1 - m_2) \frac{|e| H}{\mu} \frac{H}{4\pi c}. \quad (13a)$$

Но это как раз прежнее уравнение (24) в § 4 гл. VI т. I.

Преимущество нового метода перед старым проявляется, однако, в том, что мы получаем теперь из одной и той же математической схемы и собственные значения, и правила отбора и поляризации. Так как собственные функции и построенные из них матричные элементы координат остаются теми же, что и для задачи Кеплера без магнитного поля, то мы можем воспользоваться для правила отбора для m уравнением (5.2). Оно утверждает, что с отличной от нуля интенсивностью (дипольное излучение!) могут происходить только переходы

$$\begin{array}{c} \nearrow m \\ m \\ \searrow m \pm 1. \end{array}$$

Одновременно мы можем получить относящиеся сюда поляризации из приведённой в § 5 связи этих переходов с z -компонентой или соответственно с $(x + jy)$ -компонентой матричного элемента. Поэтому при переходе $m \rightarrow m$ происходит колебание, линейно-поляризованное в направлении оси z (направление магнитного поля), при переходе $m \rightarrow m \pm 1$ — колебание, поляризованное по кругу в плоскости, перпендикулярной к магнитному полю. В первом случае $m_1 - m_2 = 0$ и, согласно (13), $\Delta \nu = 0$; во втором случае $m_1 - m_2 = \pm 1$.

следовательно, согласно (13)

$$\Delta\nu = \pm \frac{e}{\mu} \frac{H}{4\pi c}. \quad (136)$$

Тем самым мы вывели нормальный триплет Лоренца, соответствующий рис. 85 в § 4 гл. VI т. I. Путём вычисления входящих сюда матричных элементов можно получить и интенсивности трёх компонент триплета, а именно, при поперечном наблюдении интенсивность средней компоненты вдвое большую интенсивности каждой из крайних.

Это непосредственно следует из (1.9.40) и (1.9.42), если учесть, что при поперечном наблюдении, например, в u -направлении участвует только ξ -компонента, следовательно, только половина вычисленной в (1.9.42) интенсивности. Повторим здесь уже сделанное на стр. 68 замечание: в эффекте Зеемана различаются не состояния с различным значением m , но только различные типы переходов $m \rightarrow m$, $m \rightarrow m-1$, $m \rightarrow m+1$. Все переходы $m \rightarrow m$ дают среднюю компоненту, все переходы $m \rightarrow m \pm 1$ одну из боковых. Поэтому для вычисления интенсивностей надлежит пользоваться просуммированными по m формулами (1.9.40), (1.9.42), а не непросуммированной формулой (1.9.38).

В § 3 мы рассматривали плотность заряда ρ в кеплеровой задаче и сравнивали её распределение в радиальном направлении с размерами орбит старой теории. Мы хотим рассмотреть теперь распределение плотности заряда при эффекте Зеемана, и в особенности его зависимость от углов, и сравнить результаты со старой теорией пространственной ориентации орбит. Согласно (4) мы имеем:

$$\rho = \psi\psi^* = R^2 [P_l^m(\cos\vartheta)]^2;$$

часть, зависящая от φ , здесь выпала, часть, зависящая от r , нас сейчас не интересует. Мы интересуемся, следовательно, только задаваемой P_l^m частью волновой функции, зависящей от ϑ . Получаем непосредственно:

$$l=0, \quad m=0, \quad P^2=1, \quad \text{нет зависимости от угла}; \quad (14)$$

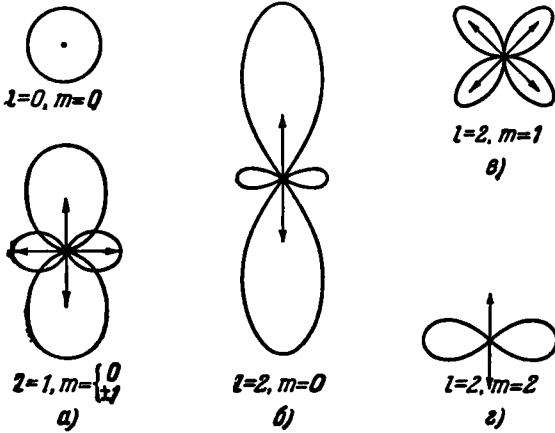
$$l=1, \quad \begin{cases} m=0, & P^2 = \cos^2\vartheta, & \text{максимум при } \vartheta=0, 1) \\ m=\pm 1, & P^2 = \sin^2\vartheta & \text{» » } \vartheta = \frac{\pi}{2}; \end{cases} \quad (15)$$

$$l=2, \quad \begin{cases} m=0, & P^2 = \left(\frac{3}{2}\cos^2\vartheta - \frac{1}{2}\right)^2 & \text{максимум при } \vartheta=0 \text{ и } \frac{\pi}{2}, \\ m=\pm 1, & P^2 = 9\sin^2\vartheta\cos^2\vartheta & \text{» » } \vartheta = \frac{\pi}{4} \text{ и } \frac{3\pi}{4}, \\ m=\pm 2, & P^2 = 9\sin^4\vartheta & \text{» » } \vartheta = \frac{\pi}{2}. \end{cases} \quad (16)$$

На рис. 11 изображена при заданном r плотность ρ как функция полярного угла ϑ . Этот рисунок надо сравнить с рис. 29 в § 8 гл. II т. I (J на рисунке в т. I соответствует нашему l , аналога случаю $l=0$ в т. I не рассматривалось). Рис. 11, a охватывает оба подслучая для $l=1$, именно $m=0$ и $m=\pm 1$; его надо сравнить с рис. 29, a . Мы получаем два выделенных направления для вероятности нахождения электрона, именно $\vartheta=0$ или $\vartheta = \frac{\pi}{2}$. Нормали к этим направлениям, которые отвечают направлению,

1) Предполагается ещё и диаметрально противоположное направление $\vartheta = \pi$.

момента (стрелкам) на рисунке первого тома, отмечены стрелками и теперь. Эти стрелки совпадают с прежними, однако плоскости орбит, которые мыслились раньше точными, теперь размазаны. Прежний рис. 29, б для ясности разбит теперь на три рисунка: 11, б, в и г. Стрелка на рис. 11, г имеет направление $\vartheta = 0$, на рис. 11, б



нарисована под углом $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ (в пренебрежении вторичными максимумами вероятности нахождения электрона под углом $\vartheta = \frac{\pi}{2}$); оба имеют своих аналогов на рис. 29, б. Стрелки на рис. 11, в направлены под углами $\vartheta = \frac{\pi}{4}$ и $\vartheta = \frac{3\pi}{4}$; они имеют приближительные, но не точные аналоги в стрелках на рис. 29, б, наклонённых под углами $\arccos\left(\pm\frac{1}{2}\right)$. Итак,

Рис. 11. Здесь изображены с соблюдением масштаба «нормированные на единицу» шаровые функции, т. е. величины $(P_l^m)^2$ с добавлением нормировочных множителей

$$N^2 = \frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}$$

Только рис. 11, б уменьшен по сравнению со всеми остальными в отношении 2:1. Стрелки направлены, как отмечено в тексте, в направлениях, перпендикулярных к основным максимумам кривых. На рис. 11 стрелки отсутствуют, так как их направление было бы неопределённым.

число выделенных направлений совпадает в обеих теориях точно, их положения — только приближительно.

Мы ближе подойдем к прежним представлениям о вращении по орбитам, если рассмотрим теперь наряду с плотностью связанный с ней ток j , который задаётся уравнением (1.7.7). Вычислим отдельные составляющие тока в направ-

лениях полярных координат r , ϑ и φ . Сразу получаем:

$$j_r = j_\vartheta = 0. \tag{17}$$

При доказательстве используем

$$\text{grad}_r = \frac{\partial}{\partial r}, \quad \text{grad}_\vartheta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad \text{grad}_\varphi = \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{18}$$

Образуем, согласно (4),

$$\left. \begin{aligned} u^* \text{grad}_r u &= R \frac{dR}{dr} [P_l^m(\cos \vartheta)]^2 = u \text{grad}_r u^*, \\ u^* \text{grad}_\vartheta u &= \frac{R^2}{r} P_l^m(\cos \vartheta) \frac{d}{d\vartheta} P_l^m(\cos \vartheta) = u \text{grad}_\vartheta u^*. \end{aligned} \right\} \tag{18a}$$

Отсюда следует, что первый член в правой части (1.7.7) для r - и ϑ -компонент исчезает. То же будет и для второго члена, так как, согласно (1) и с учётом $x = r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y = r \sin \vartheta \sin \varphi$:

$$\left. \begin{aligned} A_x &= \sin \vartheta \cos \varphi A_\alpha + \sin \vartheta \sin \varphi A_\beta = 0, \\ A_y &= \cos \vartheta \cos \varphi A_\alpha + \cos \vartheta \sin \varphi A_\beta = 0. \end{aligned} \right\} \tag{19}$$

Тем самым уравнение (17) доказано.

Иначе обстоит дело для φ -составляющей. Здесь

$$u^* \operatorname{grad}_{\varphi} u = \frac{imR^2 [P_l^m(\cos \vartheta)]^2}{r \sin \vartheta} = \frac{im |\psi|^2}{r \sin \vartheta} = -u \operatorname{grad}_{\varphi} u^*, \quad (19a)$$

$$A_{\varphi} = -\sin \varphi A_x + \cos \varphi A_y = \frac{1}{2} Hr \sin \vartheta. \quad (19b)$$

Теперь отличны от нуля оба члена в правой части (1.7.7); это уравнение даёт (через μ обозначена масса электрона):

$$j_{\varphi} = \frac{\hbar}{\mu} \frac{m |\psi|^2}{r \sin \vartheta} - \frac{eH}{2\mu c} r \sin \vartheta |\psi|^2. \quad (20)$$

Второй член описывает замеченное на атоме действие магнитного поля. Мы легко узнаем в нём ларморову прецессию ω_L из (7) и можем переписать его в виде:

$$v |\psi|^2; \quad v = \omega_L r \sin \vartheta; \quad (20a)$$

v — линейная скорость, с которой вращается плотность $\rho = |\psi|^2$ вокруг задаваемой магнитным полем оси; она равна угловой скорости (прежней групповой скорости $b = \omega_L$), умноженной на расстояние от оси $r \sin \vartheta$.

Первый член в (20) выражает собой ориентирующее или избирательное действие магнитного поля на электрические токи, независимо текущие в атоме, или, как можно также сказать, его действие на токи в пределе $H = 0$. В отсутствии магнитного поля нет никаких оснований предпочитать собственную функцию с $e^{+im\varphi}$ собственной функции с $e^{-im\varphi}$. Мы могли бы использовать также и $\left\{ \begin{smallmatrix} \cos \\ \sin \end{smallmatrix} \right\} m\varphi$; в последнем случае вычислявшееся в (19a) выражение $u^* \operatorname{grad}_{\varphi} u$ оказалось бы действительным. Но тогда и φ -составляющая тока в (вырожденной) задаче Кеплера обратилась бы в нуль, как и r - и ϑ -составляющие. Только магнитное поле приводит к различию обоих «направлений вращения» электрона (это значит обоих выражений $e^{\pm im\varphi}$) и ставит им в соответствие в эффекте Зеемана различные уровни энергии (собственные значения). Следовательно, предыдущее вычисление полностью законно при наличии магнитного поля H , а потому и в пределе при $H \rightarrow 0$, когда собственные функции эффекта Зеемана переходят в собственные функции кеплеровой задачи, но направление магнитного поля остаётся физически выделенным. Это полностью соответствует пространственному квантованию старой теории: мы должны были бы рассматривать в § 8 гл. II т. I задачу Кеплера как предел при $H \rightarrow 0$ задачи с наличием магнитного поля.

Чтобы сделать количественное сравнение с полученными там результатами, мы перейдём от тока j_{φ} в пределе $H = 0$ к магнитному моменту M , ось которого направлена в направлении $\vartheta = 0$. Мы вычислим его с помощью правила: магнитный момент равняется силе тока (электромагнитного), умноженной на площадь обтекаемой током поверхности. Току j_{φ} («току частиц»), протекающему через площадку $d\sigma$ (нормальную к φ), соответствует число частиц, пересекающих эту площадку за единицу времени $j_{\varphi} d\sigma$, и поэтому электрический ток $\frac{e}{c} j_{\varphi} d\sigma$ (e — в электростатических единицах); обтекаемая поверхность равна $\pi r^2 \sin^2 \vartheta$. Следовательно, вклад $d\sigma$ в магнитный момент благодаря первому члену (20) будет

$$dM = \frac{e}{\mu} \frac{\hbar}{c} m |\psi|^2 \pi r \sin \vartheta d\sigma = \frac{e}{\mu} \frac{\hbar}{4\pi c} m |\psi|^2 d\tau,$$

где $d\tau = 2\pi r \sin \vartheta d\sigma$ означает объём торообразной трубки, которая получается из $d\sigma$ вращением вокруг оси $\vartheta = 0$. Суммирование всех таких вкладов приводит, в силу условия нормировки $\int |\psi|^2 d\tau = 1$, к

$$M = \frac{e}{\mu} \frac{h}{4\pi c} m. \quad (21)$$

Мы получим, следовательно, значение, равное в точности m «боровским магнетонам» [ср. т. I, гл. II, § 8, уравнение (13), где вместо m стоит j , а вместо μ — m]. Это простое волновомеханическое обоснование соотношения старой квантовой теории мы рассматриваем вместе с Ферми¹⁾ как блестящее подтверждение выражений Шредингера для тока и заряда.

Вместо магнитного момента мы можем вычислить аналогичным образом и механический момент потока частиц, пользуясь правилом: механический момент равен массе, умноженной на поток частиц и на радиус; как и магнитный момент M , механический момент \mathfrak{M} надо вычислять относительно оси z , следовательно, радиус будет равен $r \sin \vartheta$. Из рассмотрения тороидальной трубки объёма $d\tau$ в пределе при $H = 0$ получаем:

$$d\mathfrak{M}_z = \mu j_{\varphi} r \sin \vartheta d\tau = \hbar m |\psi|^2 d\tau$$

и после суммирования по всем таким трубкам

$$\mathfrak{M}_z = \hbar m,$$

что также находится в согласии с прежней теорией, согласно которой $2\pi\mathfrak{M}_z$ должен был быть целым кратным \hbar .

Но наряду с этим согласием мы должны упомянуть и противоречие, которое возникает между волновой механикой, с одной стороны, и пространственным квантованием старой теории — с другой. Согласно последней не только $2\pi\mathfrak{M}_z$, но и $2\pi\mathfrak{M}$ (\mathfrak{M} — полный механический момент) должен был бы также быть целым кратным \hbar , так что угол $\alpha = (\mathfrak{M}z)$ полностью определён [ср. т. I, гл. II, § 8, уравнение (8)]. С точки зрения волновой механики это уже не верно: вместе с представлением об орбитах теряется в волновой механике и представление об определённом направлении механического момента: определённой остаётся только выделенная благодаря магнитному полю компонента \mathfrak{M}_z . Глубокие основания этого обстоятельства мы обсудим в § 3 следующей главы.

На этом мы закончим обсуждение ориентирующего действия магнитного поля. Мы перейдём теперь к деформирующему атом воздействию, которое описывается вторым членом в (20). Мы вычислим соответствующий этому члену магнитный момент, так же как и для первого члена, если умножим его на

$$\frac{e}{c} d\sigma \pi r^2 \sin^2 \vartheta$$

(измеренный в электромагнитных единицах заряд, умноженный на сечение πr^2 на площадь обтекаемой поверхности) и проинтегрируем по всем тороидальным трубкам объёма $d\tau = 2\pi r \sin \vartheta d\sigma$. Тогда получаем:

$$dM = -\frac{e^2 H}{2\mu c^2} |\psi|^2 \pi r^3 \sin^3 \vartheta d\sigma = -\frac{e^2 H}{4\pi c^2} |\psi|^2 r^3 \sin^3 \vartheta d\tau, \\ M = -\frac{e^2 H}{4\mu c^2} \Theta, \quad (22)$$

1) E. Fermi, Nature, декабрь 1926 г., стр. 876.

где

$$\Theta = \Theta_H = \int |\psi|^2 r^2 \sin^2 \vartheta d\tau \quad (23)$$

есть момент инерции (делённый на массу) распределения плотности $|\psi|^2$ относительно направления магнитного поля ($r \sin \vartheta$ — расстояние до оси z).

К формулам (22) и (23) надо ещё добавить статистическую поправку. В формуле (4) мы предположили, что ось симметрии собственной функции ($\vartheta = 0$) совпадает с направлением магнитного поля. В общем случае (для состояний, которые не обладают сферической симметрией) это обстоятельство не имеет места. Но если мы произведём усреднение по всем положениям атомов, то, в силу равноправия осей x , y и z , получим:

$$\int \rho x^2 d\tau = \int \rho y^2 d\tau = \int \rho z^2 d\tau = \frac{1}{3} \int \rho r^2 d\tau = \frac{1}{3} \bar{\Theta},$$

где

$$\bar{\Theta} = \int \rho r^2 d\tau \quad (24)$$

означает не зависящую от положения атома меру распределения плотности в нём и среднее значение $\Theta = \Theta_H$ будет равно как раз $\frac{2}{3} \bar{\Theta}$. Поэтому из (22) путём усреднения получаем:

$$M = - \frac{e^2 H}{6\mu c^2} \bar{\Theta}. \quad (25)$$

Если мы положим, наконец,

$$\frac{M}{H} = \chi,$$

то χ будет означать *диамагнитную восприимчивость* атома (после умножения на число Авогадро — диамагнитную восприимчивость на грамм-атом). Мы получаем, таким образом, из (25) знаменитую *формулу Ланжевена* для диамагнетизма

$$\chi = - \frac{e^2 \bar{\Theta}}{6\mu c^2}. \quad (26)$$

Связь с эффектом Зеемана и ларморовой прецессией проявляется в нашем выводе совершенно ясно. Шаг вперёд, который сделала здесь волновая механика по сравнению с прежним классическим выводом или старой квантовой теорией, состоит лишь в точном определении момента инерции через плотность $\rho = |\psi|^2$ в (23).

Все предыдущие вычисления относились только к случаю водорода (да и то в пренебрежении спином электрона). Мы должны теперь кратко показать, как можно распространить их на настоящий нормальный эффект Зеемана, который происходит во многоэлектронных синглетных системах (ср. начало этого параграфа). Представим себе уравнения (3) написанными для каждого электрона, так что V содержит не только кулоновский потенциал ядра, но и действие всех остальных электронов, однако будем считать, что V всё ещё можно рассматривать как функцию только от r (ср., например, с методом самосогласованного поля в гл. X). Тогда выражение (4) и все следствия сохраняют свою силу, с той лишь разницей, что вместо (13) для i -го электрона надо будет писать

$$\Delta W_i = \hbar \omega_L m_i, \quad (27)$$

где m_i — относящееся к i -му электрону магнитное квантовое число, ΔW_i — его вклад в дополнительную магнитную энергию; ω_L для всех электронов одинакова. Вклады в энергию складывают алгебраически, так же как и магнитные квантовые числа [ср. т. I, гл. VIII, § 3, уравнение (8) с $\sum m_i = 0$ для синглетных систем]. Поэтому из (27) путём сложения снова получается характерная формула (13) нормального эффекта Зеемана, в которой m имеет смысл результирующего магнитного квантового числа.

Токи и плотности отдельных электронов также складываются алгебраически (что не находится в противоречии с тем, что волновые функции ψ_i входят в результирующую волновую функцию $\psi = \prod_i \psi_i$ мультипликативно).

Поэтому из (20) путём суммирования по всем электронам получается результирующий ток j , а путём интегрирования по конфигурационному пространству — магнитные моменты (21) и (25). Величина (21) представляет собой *парамагнитный момент* атома с результирующим магнитным квантовым числом m ; из него, в основном следуя развитым в § 8 гл. VIII т. I правилам, вычисляются *парамагнитная восприимчивость* и *постоянная Кюри* — всё это, конечно, в предположении, что результирующий спин атома обращается в нуль. Напротив, (25) представляет вызванный магнитным полем H *диамагнитный момент* атома; представление (24) момента инерции $\bar{\Theta}$ через распределение плотности ρ сохраняет свою силу и для многоэлектронных систем. Даваемая выражением (26) *диамагнитная восприимчивость* является универсальным свойством любых систем. Она выступает в чистом виде, когда (21) исчезает, например в состояниях с замкнутыми оболочками; ср. § 11.

§ 7. НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР ВОДОРОДА, ЕГО СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ

Особенно красивая с математической точки зрения черта теории Шредингера состоит в том, что она связывает единым аналитическим процессом непрерывный спектр водорода с дискретным.

Исходя из (1.1) мы запишем собственные функции с добавленным нормировочным множителем N в виде (1.2)

$$\psi = N R P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (1)$$

и получим для их радиальной части прежнее дифференциальное уравнение (1.3). Однако, в то время как в § 1 мы рассматривали исключительно случай $W < 0$, теперь мы положим

$$W > 0. \quad (2)$$

Тогда величина A в (1.3а) будет положительна, и поэтому вместо (1.4) нам надо будет положить

$$A = \frac{2m}{\hbar^2} W = \frac{1}{r_0^2}. \quad (3)$$

Тогда асимптотическое поведение R получится согласно (1.3) (пренебрежение всеми членами, исчезающими при $r \rightarrow \infty$) из уравнения

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{R}{r_0^2} = 0, \quad R = e^{\pm i \frac{r}{r_0}}. \quad (4)$$

Между двумя его решениями нельзя сделать выбора, так как ни одно из них не становится бесконечным при $r \rightarrow \infty$ (они оба обращаются в нуль, как покажет более тщательное исследование). Мы положим аналогично (1.4а) и (1.5)

$$\rho = 2l \frac{r}{r_0} = 2l \sqrt{Ar}, \quad R = e^{-\frac{p}{2}} \sigma \quad (5)$$

и получим для σ прежнее дифференциальное уравнение (1.7). Подстановка (1.7а) даст тогда, как и ранее, в качестве единственно возможного показателя при $r \rightarrow 0$ $\alpha = l$. Следовательно, σ ведёт себя в нуле, как ρ^l ; напишем:

$$\sigma = \rho^l \omega(\rho), \quad \omega(\rho) = a_0 + a_1 \rho + \dots \quad (6)$$

Однако «метод полиномов» теперь откажется нам служить. Действительно, если потребовать обрыва степенного ряда (6) для ω , то мы получим для $\frac{B}{\sqrt{A}}$ мнимое значение, что противоречит нашим допущениям относительно A или W . Поэтому W остаётся неопределённым. Все положительные значения W являются возможными собственными значениями. Мы получили *непрерывный спектр* собственных значений $W > 0$, который на границе $W = 0$ непрерывно примыкает к дискретному спектру.

Займёмся аналитическим представлением радиальной составляющей R собственной функции непрерывного спектра. В силу (5) и (6)

$$R = e^{-\frac{p}{2}} \rho^l \omega(\rho). \quad (7)$$

Мы сравним это с прежним представлением (1.16), в котором $\omega(\rho)$ было заменено на $L_{n+l}^{(2l+1)}$. Последняя величина была многочленом от действительного аргумента ρ , в то время как теперь ω является трансцендентной функцией (необрывающимся степенным рядом) мнимого аргумента ρ . Однако обе эти функции удовлетворяют одному и тому же дифференциальному уравнению (1.13) и являются поэтому аналитически родственными.

Нам надо установить прежде всего, какой смысл имеет входящее в (1.13) число n . Для этого воспользуемся соотношениями (1.9а) и (1.3а), которые дадут

$$n = \frac{B}{\sqrt{-A}} = \frac{\frac{mZe^2}{\hbar^2}}{\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}}. \quad (8)$$

Выразим W через импульс p или волновое число k свободного электрона:

$$W = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (9)$$

Тогда получим из (8)

$$n = \frac{mZe^2}{\hbar^2 k} = \frac{Z}{ika}, \quad (10)$$

где a — водородный радиус элементарной теории:

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (10a)$$

Следовательно, главное квантовое число n дискретного спектра становится в случае непрерывного спектра чисто мнимым числом (не обязательно целым).

Это обстоятельство соответствует с формальной точки зрения переходу прежних полиномов L в трансцендентную функцию W . При этом, согласно (1.18), для аргумента непрерывной собственной функции получаем:

$$\rho = 2ikr. \quad (11)$$

Мы перепишем теперь полином L_n в таком виде, чтобы в нём можно было бы заменить n нецелым значением (10). При этом оказывается удобным изменить нормировку L_n так, чтобы не коэффициент при старшей степени равнялся $(-1)^n$ [ср. (2.7)], но коэффициент при низшей степени ρ^0 был бы равен 1. Для этого нам надо будет положить вместо (2.1)

$$L_n(\rho) = \frac{e^\rho}{n!} \frac{d^n}{d\rho^n} (\rho^n e^{-\rho}). \quad (12)$$

Но, в силу теоремы Коши для каждой аналитической функции f , выполняется соотношение

$$f(\rho) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{z-\rho} dz,$$

в котором интегрирование выполняется по какому-либо замкнутому в положительном направлении вокруг точки $z = \rho$ контуру. Из этой формулы следует:

$$\frac{1}{n!} \frac{d^n f(\rho)}{d\rho^n} = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{(z-\rho)^{n+1}} dz. \quad (13)$$

Если мы положим здесь $f(\rho) = \rho^n e^{-\rho}$ и умножим на e^ρ , то левая часть (13) совпадёт с правой частью (12). Мы можем, следовательно, написать вместо (12)

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2\pi i} e^\rho \oint z^n e^{-z} (z-\rho)^{-n-1} dz. \quad (14)$$

В этой формуле правая часть сохраняет смысл и тогда, когда мы переходим от целочисленного n к произвольному. Можно поэтому рассматривать (14) как решение дифференциального уравнения Лагерра (1.14) для произвольного n .

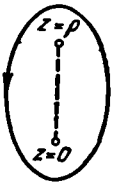


Рис. 12. Путь интегрирования для целой трансцендентной функции $L_n(\rho) = L(-n, 1, \rho)$ для чисто мнимого $\rho = 2ikr$.

Относительно контура интегрирования в (14) надо заметить следующее: он должен окружать не только точку $z = \rho$, что уже требовалось в (13), но и точку $z = 0$, иначе при однократном обходе и нецелом n путь интегрирования не был бы замкнутым. Напротив, путь интегрирования, изображённый на рис. 12, является замкнутым, так как ветвление z^n в точке $z = 0$ компенсируется ветвлением $(z-\rho)^{-n}$ в точке $z = \rho$. Представление (14) несколько упрощается с помощью подстановки

$$y = z - \rho,$$

поскольку при этом ρ появляется только в одном из стоящих под интегралом множителей:

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2\pi i} \oint (y+\rho)^n e^{-y} y^{-n-1} dy. \quad (15)$$

Контуром интегрирования служит теперь окружающий точки $y = 0$ и $y = -\rho$ замкнутый контур рис. 12а; значение обоих уходящих в бесконечность «хвостов» мы обсудим несколько ниже.

Мы получим более симметричное представление, если введём новую переменную интегрирования x , положив

$$y = \rho \left(x - \frac{1}{2} \right), \quad y + \rho = \rho \left(x + \frac{1}{2} \right). \quad (15a)$$

Тогда из (15) получится:

$$L_n(\rho) = \frac{e^{\frac{\rho}{2}}}{2\pi i} \oint \left(x + \frac{1}{2} \right)^n \left(x - \frac{1}{2} \right)^{-n-1} e^{-\rho x} dx. \quad (16)$$

Контур интегрирования в x -плоскости окружает обе точки ветвления $x = \pm \frac{1}{2}$.

Из всего хода предшествующих рассуждений ясно, что интегралы (14), (15) и (16) должны удовлетворять дифференциальному уравнению Лагерра (1.14). Для того чтобы проверить это путём вычисления, удобнее всего было бы исходить из интегрального представления (15), выполняя дифференцирование по ρ под знаком интеграла и применяя интегрирование по частям, в ходе которого проинтегрированные члены естественно обращаются в нуль при обходе по замкнутому контуру. Но то же самое справедливо и для «хвостов» рис. 12а (мы могли бы назвать их «квазизамкнутыми» контурами). Действительно, на концах этих «хвостов» подинтегральное выражение обращается в нуль благодаря множителю e^{-y} , так как там y обладает бесконечно большой положительной действительной частью; при интегрировании по частям проинтегрированные члены пропадают по той же причине, и выполнение дифференциального уравнения Лагерра проверяется так же, как и в случае замкнутого контура. Мы обозначим получающиеся таким образом решения дифференциального уравнения Лагерра через

$$\frac{1}{2} K_1 \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} K_2 \quad (17)$$

и получим из рис. 12а

$$L = \frac{1}{2} (K_1 + K_2). \quad (18)$$

Такая связь аналогична известному соотношению между функцией Бесселя J и функциями Ханкеля H_1 и H_2 :

$$J = \frac{1}{2} (H_1 + H_2) \quad (19)$$

[ср. (1.3.26)]. Аналогично J функция L является целой трансцендентной функцией, аналогично H_1 , H_2 функции K_1 , K_2 обладают особенностями в начале координат. Действительно, при $\rho = 0$ обе точки ветвления рис. 12а сливаются, пути интегрирования для K_1 и K_2 оказываются тогда «закатыми» между этими двумя особенностями, что приводит к особенности в интеграле. Напротив, путь интегрирования для L сохраняет свободу перемещения при $\rho = 0$ и может быть распространён исключительно на регулярные точки; здесь нет причины для возникновения особенностей. Любые две из трёх наших функций L , K_1 и K_2 образуют полную систему решений дифференциального уравнения Лагерра, опять в полном соответствии с дифференциальным уравнением Бесселя и его тремя частными решениями J , H_1 и H_2 .

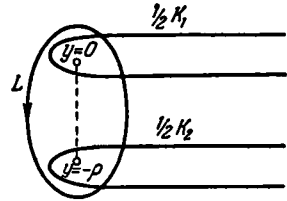


Рис. 12а. Путь интегрирования для $L_n(\rho)$.

$$\frac{1}{2} K_1(\rho) \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} K_2(\rho).$$

Используем интегральное представление (15) для разложения в ряды, а именно для разложения L во всюду сходящийся ряд по возрастающим степеням ρ и для разложения K_1 и K_2 в асимптотические ряды по убывающим степеням ρ .

Из рис. 12а видно, что мы можем в том случае, когда ρ принимает комплексное значение, так выбрать путь интегрирования, что во всех его точках будет $|y| > |\rho|$ и поэтому биномиальный ряд

$$(y + \rho)^n = x^n \left(1 + \binom{n}{1} \frac{\rho}{y} + \binom{n}{2} \frac{\rho^2}{y^2} + \dots \right)$$

будет сходящимся.

Выражение (15) приведёт тогда к

$$L_n(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{n}{k} \rho^k \frac{1}{2\pi i} \oint e^{-y} y^{-k-1} dy. \quad (20)$$

В силу теоремы Коши [уравнение (13) с $\rho = 0$, $f = e^{-y}$] входящие сюда интегралы равны

$$2\pi i (-1)^k k!$$

Поэтому из (20) следует:

$$L_n(\rho) = \sum_k (-1)^k \binom{n}{k} \frac{\rho^k}{k!} = 1 - n \frac{\rho}{1!} + \frac{n(n-1)}{1 \cdot 2} \frac{\rho^2}{2!} + \dots \quad (21)$$

Как и следовало ожидать, этот ряд является частным случаем ряда для конфлюэнтной гипергеометрической функции. Именно, если сравнить (21) с (2.20), то мы немедленно убедимся в справедливости соотношения

$$L_n(\rho) = F(-n, 1, \rho), \quad (22)$$

обобщающего соотношение (2.24), в котором n было заменено целым числом k , а трансцендентная функция Лагерра L_n — полиномом Лагерра L_k .

Рассмотрим теперь верхний «хвост» рис. 12а, представляющий собой функцию $\frac{1}{2} K_1$. Если мы предположим, что ρ велико, то для внутренней части контура будет $|y| < |\rho|$. Поэтому напишем разложение

$$(y + \rho)^n = \rho^n \left(1 + \binom{n}{1} \frac{y}{\rho} + \binom{n}{2} \frac{y^2}{\rho^2} + \dots \right)$$

и получим из (15):

$$\frac{1}{2} K_1 = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{n}{k} \rho^{n-k} \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{-y} dy}{y^{n+1-k}}. \quad (23)$$

Используем здесь представление Γ -функции, которое более удобно, чем обычное представление действительным эйлеровым интегралом (ср. дополнение 7):

$$\frac{1}{\Gamma(n+1)} = \frac{e^{i\pi n}}{2\pi i} \oint \frac{e^{-y} dy}{y^{n+1}}. \quad (24)$$

Интегрирование следует проводить здесь по тому же контуру, что и в (23), т. е. начиная с положительной бесконечности на действительной оси, обходить в положительном направлении точку нуль и возвращаться в положительную бесконечность на действительной оси. При этом многозначность y^n

надо фиксировать таким образом, чтобы в точке $y = 1$ на начальной ветви было бы $y^n = +1$. С учётом (24) соотношение (23) даёт:

$$\frac{1}{2} K_1 = \sum_k \binom{n}{k} \rho^{n-k} \frac{e^{-k\pi(n-k)}}{\Gamma(n+1-k)},$$

для чего мы можем также, согласно формуле (9) дополнения 7, написать:

$$\frac{1}{2} K_1 = \frac{(-\rho)^n}{\Gamma(n+1)} \left(1 - \frac{n^2}{11\rho} + \frac{n^2(n-1)^2}{21\rho^2} - \dots \right). \quad (25)$$

Этот ряд расходится, однако должным образом оборванный он правильно передаёт асимптотическое поведение K_1 при $\rho \rightarrow \infty$.

Чтобы перейти к K_2 , нам надо рассмотреть нижний «хвост» рис. 12а, однако при этом надо учитывать, что из-за требуемой (18) связи между L , K_1 и K_2 надо добавить к представлению (15) множитель

$$e^{-2\pi i(n+1)} = e^{-2\pi i n},$$

Именно, после того как мы фиксировали значение y^n на начальной ветви верхнего контура, этот множитель определяет значение y^n на конечной ветви верхнего, а тем самым, и на начальной ветви нижнего контура. После того как мы сделаем ещё подстановку $z = y + \rho$ [т. е. обратную сделанной при переходе от (14) к (15)], нужно разложить в ряд

$$(z - \rho)^{-n-1} = (-\rho)^{-n-1} \left[1 - \binom{-n-1}{1} \frac{z}{\rho} + \binom{-n-1}{2} \frac{z^2}{\rho^2} - \dots \right],$$

и при вторичном использовании (24) получим:

$$\frac{1}{2} K_2 = e^{-2\pi i n} \rho \sum_{k=0}^{\infty} (-\rho)^{-n-1-k} \binom{-n-1}{k} \frac{e^{k\pi(n+k+1)}}{\Gamma(-n-k)}.$$

Согласно формуле (10) дополнения 7 мы можем написать вместо этого

$$\frac{1}{2} K_2 = \frac{e^{\pi} (+\rho)^{-n}}{\rho \Gamma(-n)} \left[1 + \frac{(n+1)^2}{11\rho} + \frac{(n+1)^2(n+2)^2}{21\rho^2} + \dots \right]. \quad (26)$$

Складывая (25) и (26), получим асимптотическое поведение L , которое нам придётся использовать в § 10.

Только теперь можем мы перейти к предмету этого параграфа: собственным функциям непрерывного спектра задачи Кеплера. Радиальную часть R (7) этих функций $\varpi = L_{n+i}^{(2l+1)}$ мы вычислим из (15), записывая $n+i$ вместо n и выполняя $(2l+1)$ -кратное дифференцирование по ρ под знаком интеграла. Опуская факториальный множитель и добавляя [из соображений действительности, ср. ниже (32)] $(-l)^l$, мы получаем, согласно (7):

$$R = e^{-\frac{\rho}{2}} (-l\rho)^l \frac{1}{2\pi i} \oint (y + \rho)^{n-l-1} e^{-y} y^{-n-l-1} dx, \quad (27)$$

где интегрирование выполняется по замкнутому пути, обозначенному на рис. 12а буквой L . Мы получим более симметричное представление, если воспользуемся уже применявшейся в (16) подстановкой

$$y = \rho \left(x - \frac{1}{2} \right), \quad y + \rho = \rho \left(x + \frac{1}{2} \right).$$

а именно:

$$R = (l\rho)^{-l-1} \frac{1}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2} \right)^{n-l-1} \left(x - \frac{1}{2} \right)^{-n-l-1} e^{-\rho x} dx. \quad (28)$$

Аналогичное представление содержалось уже в первой работе Шредингера 1926 г.

Разложение R вблизи нуля можно получить из (27) с помощью уже использованного в (21) метода: разложения в биномиальный ряд $(y+p)^{n-l-1}$ в предположении $|\rho| < |y|$ и вычисления остающихся интегралов по теореме Коши. Без труда находим:

$$R = -\frac{e^{-\frac{\rho}{2}} (-\rho)^l}{(2l+1)!} \left[1 - \binom{n-l-1}{1} \frac{\rho}{(2l+2)} + \binom{n-l-1}{2} \frac{\rho^2}{(2l+2)(2l+3)} + \dots \right] \quad (29)$$

С другой стороны, мы найдём асимптотическое поведение R для $\rho \rightarrow \infty$, если рассмотрим две функции Q_1 и Q_2 , для которых

$$R = \frac{1}{2} (Q_1 + Q_2). \quad (30)$$

При этом $\frac{1}{2} Q_1$ и $\frac{1}{2} Q_2$ задаются той же формулой (27), что и R , но только с изменённым путём интегрирования: вместо замкнутого контура L на рис. 12а следует использовать контуры K_1 и соответственно K_2 . Аналогично (25) и (26) получаем:

$$\frac{1}{2} Q_1 = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{n-1} \frac{e^{-i\pi(n-\frac{l}{2})}}{\Gamma(n+l+1)} \left[1 - \binom{n-l-1}{1} \frac{n+l}{\rho} + \dots \right], \quad (31)$$

$$\frac{1}{2} Q_2 = e^{+\frac{\rho}{2}} (-\rho)^{-n-1} \frac{e^{-i\pi(n+\frac{l}{2})}}{\Gamma(-n+l+1)} \left[1 + \binom{-n-l-1}{1} \frac{-n+l}{1} + \dots \right], \quad (32)$$

причём (32) получается из (31) заменой ρ , n , l на $-\rho$, $-n$, $-l$. Так как ρ и n чисто мнимы, то это означает, что Q_1 и Q_2 комплексно-сопряжены друг к другу. Поэтому, в силу (30), R действительно, что, впрочем, можно усмотреть и непосредственно из интеграла (28) (заменой l , ρ , n , x на $-l$, $-\rho$, $-n$, $-x$).

В первом приближении Q_1 и Q_2 ведут себя как сходящаяся и соответственно расходящаяся сферические волны. Именно, согласно (31) и (32) с $\rho = 2ikr$ (11), получаем:

$$Q_{1,2} = C e^{\mp i\gamma} \frac{e^{\mp ikr}}{\pm ikr}. \quad (33)$$

Здесь положено:

$$\left. \begin{aligned} C &= \frac{e^{-\frac{\pi}{2}|n|}}{|\Gamma(n+l+1)|}, & \Gamma(\pm n+l+1) &= |\Gamma(n+l+1)| e^{\pm i\alpha}, \\ \gamma &= |n| \ln 2kr + \alpha - \frac{\pi}{2} l. \end{aligned} \right\} \quad (33a)$$

При этом логарифмический член в γ возникает благодаря множителю

$$\rho^n = e^{n \ln(2kr)} = e^{n \left(\ln 2kr + i \frac{\pi}{2} \right)} = e^{-i|n| \ln 2kr} e^{\frac{\pi}{2}|n|}.$$

Из-за присутствия этого логарифмического члена выражение «сферическая волна» является не совсем точным, так как фаза γ всё ещё, хотя и слабо, зависит от r . Выражения «сходящаяся» и «расходящаяся» сферическая волна употребляются в предположении выбора временной зависимости в виде $e^{-i\omega t}$,

они поменялись бы ролями при зависимости $e^{+im\varphi}$. В качестве первого приближения для радиальной волновой функции R из (33) следует:

$$R = \frac{1}{2} (Q_1 + Q_2) = C \frac{\sin(kr + \gamma)}{kr}. \quad (34)$$

Это выражение справедливо, конечно, равно как и выражения (33), только асимптотически, что видно уже из того, что оно обращается в бесконечность для $r=0$, в то время как R должна быть как собственная функция всюду конечной. В действительности, согласно (29), для $r=0$ R обращается в нуль, как r^l . В противоположность этому функции Q_1 и Q_2 оказываются бесконечными для $r=0$; ведь для них путь интегрирования, как это видно из рис. 12а, зажимается между двумя особыми точками $y=0$ и $y=\rho$. Поэтому Q_1 и Q_2 не являются собственными функциями, хотя и удовлетворяют тому же самому дифференциальному уравнению (1.6), что и R , и имеют физический смысл сферических волн.

§ 8. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ И НОРМИРОВКА В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ. ВОПРОСЫ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ

Доказательство ортогональности собственных функций основывается, как мы знаем, на волновом уравнении и теореме Грина, на основании которых имеем [ср. также (1.7.19, 19а)]:

$$\frac{2m}{\hbar^2} (W_1 - W_2) \int \psi_1 \psi_2^* d\tau = \int \left(\psi_2^* \frac{\partial \psi_1}{\partial n} - \psi_1 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial n} \right) d\sigma. \quad (1)$$

Если одна из двух энергий W_1, W_2 принадлежит к дискретному, а другая — к непрерывному спектру, то правая часть исчезает для $r \rightarrow \infty$ благодаря экспоненциальному убыванию волновой функции дискретного спектра. В этом случае из (1) следует обращение в нуль интегралов ортогональности

$$\int \psi_1 \psi_2^* d\tau = 0. \quad (2)$$

Если, как в случае задачи Кеплера,

$$\psi = NRP_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (3)$$

то для

$$m_1 \neq m_2 \text{ или } m_1 = m_2, \text{ но } l_1 \neq l_2$$

(2) удовлетворяется уже за счёт угловой части решения (3). Если же, однако,

$$m_1 = m_2, \quad l_1 = l_2, \quad (3а)$$

то из (2) следует условие ортогональности для радиальной функции:

$$\int_0^\infty R_1 R_2^* r^2 dr = 0, \quad (4)$$

в полном соответствии с выводами § 2, где шла речь об ортогональности двух функций дискретного спектра. Добавим ещё, что в нашем случае благодаря действительности R можно писать R_2 вместо R_2^* . То же самое справедливо и для последующих уравнений.

Если, однако, оба значения энергий W_1, W_2 принадлежат непрерывному спектру:

$$\frac{2m}{\hbar^2} W_1 = k_1^2, \quad \frac{2m}{\hbar^2} W_2 = k_2^2 \quad (5)$$

[ср. (7.9)], то правая часть (1) не исчезает, поскольку согласно (7.34) ψ_1 и ψ_2 убывают асимптотически только как $\frac{1}{r}$, в то время как $d\sigma$ растёт пропорционально r^2 при $r \rightarrow \infty$. Поэтому правая часть (1) становится неопределённой.

Как надлежит поступать в таком случае, показали работы Вейля по общей теории интегральных уравнений и примыкающие к ним исследования Фюса¹⁾, посвящённые конкретным задачам волновой механики. Надо сравнить точку²⁾ k_1 шкалы волновых чисел не с другой точкой k_2 , но с отрезком $\Delta k_2 = \Delta$ этой шкалы, который содержит точку k_2 , но не содержит k_1 , и образовать из (1) после деления на

$$\frac{2m}{\hbar^2} (W_1 - W_2) = k_1^2 - k_2^2 \quad [\text{см. (5)}],$$

и интегрирования по Δ интегрированием по шару конечного радиуса r_g выражение

$$\int d\tau \int_{\Delta} dk_2 \psi_1 \psi_2^* = \int_{r_g} d\tau \int_{\Delta} dk_2 \left(\psi_2^* \frac{\partial \psi_1}{\partial n} - \psi_1 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial n} \right) \frac{1}{k_1^2 - k_2^2}. \quad (6)$$

Мы покажем, что правая часть обращается в нуль в пределе $r_g \rightarrow \infty$ благодаря «интерференции внутри волнового пакета Δ » при любом значении Δ . Таким образом, вместо (2) в качестве условия ортогональности мы получим³⁾ (если k_1 лежит *вне* интервала Δ):

$$\lim_{r_g \rightarrow \infty} \int d\tau \int_{\Delta} \psi_1 \psi_2^* dk_2 = 0. \quad (7)$$

1) E. F u e s, Ann. d. Phys. 81, 281 (1926), ср. в особенности § 3.

2) Вместо того чтобы проводить вычисления в шкале волновых чисел k , мы могли бы проводить их и в шкале энергий W . Мы должны были бы говорить тогда об интервале энергий ΔW и об энергетических точках W_1 и W_2 . Для наших целей шкала волновых чисел оказывается удобнее, так как при использовании её удаётся избежать появления квадратных корней, например, в аргументе $R(kr)$. В соответствии с этим и условие нормировки (см. ниже) мы запишем в шкале волновых чисел.

3) Мы могли бы записать уравнение (7) в более симметричном виде:

$$\int d\tau \frac{1}{\sqrt{\Delta_1}} \int_{\Delta_1} dk_1 \psi_1 \frac{1}{\sqrt{\Delta_2}} \int_{\Delta_2} dk_2 \psi_2^* = 0, \quad (7')$$

где мы заключили не только k_2 в интервал Δ_2 , но и k_1 в интервал Δ_1 , который должен лежать *вне* Δ_2 . Однако это не даёт никаких преимуществ по сравнению с (7), поскольку и (7) уже сходится. Выражение (7) можно получить из (7'), если выполнить

в (7') интегрирование по k_1 , вынести множитель $\sqrt{\frac{\Delta_1}{\Delta_2}}$ и провести предельный переход $\Delta_1 \rightarrow 0$. Входящие в (7') величины

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_1}} \int_{\Delta_1} dk_1 \psi_1 \quad \text{и} \quad \frac{1}{\sqrt{\Delta_2}} \int_{\Delta_2} dk_2 \psi_2$$

носят название «*собственных дифференциалов*» в отличие от собственных функций ψ_1 и ψ_2 .

Для радиальных частей R_1 и R_2 функций ψ_1 и ψ_2 отсюда аналогично (4) при условии (3а) получается:

$$\lim_{r_g \rightarrow \infty} \int_0^g r^2 dr \int_{\Delta} R_1 R_2^* dk_2 = 0. \quad (7a)$$

Для доказательства будем считать, что угловые части в (3) нормированы на единицу и что интегрирование по углам в (6) выполнено. Тогда (6) перейдет в

$$\int_0^g r^2 dr \int_{\Delta} R_1 R_2^* dk_2 = \frac{r_g^2}{k_1^2 - k_2^2} \int (R_2^* \frac{dR_1}{dr} - R_1 \frac{dR_2^*}{dr}) dk. \quad (8)$$

Правую часть надо записать для $r = r_g$. Мы можем использовать для этого асимптотическую формулу (7.34), так что получим, добавляя радиальные нормирующие множители N_1 и N_2 :

$$R_2^* \frac{dR_1}{dr} - R_1 \frac{dR_2^*}{dr} = \frac{N_1 N_2 C_1 C_2}{k_1 k_2 r_g^2} \{ \sin(k_2 r + \dots) k_1 \cos(k_1 r + \dots) - \sin(k_1 r + \dots) k_2 \cos(k_2 r + \dots) \}. \quad (8a)$$

Многоточие в этих формулах учитывает входящие согласно (7.34) в аргументы тригонометрических функций величины γ_1 , γ_2 . Так как они обращаются, однако, при $r_g \rightarrow \infty$ в бесконечность только логарифмически, то в последующих рассуждениях можно их опустить.

Производя простое тригонометрическое преобразование, мы получаем из (8a):

$$\begin{aligned} & R_2^* \frac{dR_1}{dr} - R_1 \frac{dR_2^*}{dr} = \\ & = \frac{N_1 N_2 C_1 C_2}{2k_1 k_2 r_g^2} \{ (k_1 - k_2) \sin(k_2 + k_1)r + (k_1 + k_2) \sin(k_2 - k_1)r \}_{r=r_g}. \end{aligned} \quad (8b)$$

Для того чтобы перейти к правой части (8), мы умножим это выражение на $\frac{r_g^2}{k_1^2 - k_2^2}$ и проинтегрируем по k_2 от $k_2 - \frac{\Delta}{2}$ до $k_2 + \frac{\Delta}{2}$. При этом введём в первом и соответственно во втором членах правой части (8b) переменные интегрирования:

$$x = k_2 + k_1 \quad \text{и} \quad y = k_2 - k_1. \quad (8в)$$

В силу

$$\frac{dx}{x} = \frac{dk_2}{k_2 + k_1}, \quad \frac{dy}{y} = \frac{dk_2}{k_2 - k_1}$$

правая часть (8) перейдет в

$$\int_{x_-}^{x_+} F(x) \sin r_g x \frac{dx}{x} + \int_{y_-}^{y_+} F(y) \sin r_g y \frac{dy}{y}, \quad (9)$$

где обозначено сокращённо

$$\left. \begin{aligned} x_{\pm} &= k_2 \pm \frac{\Delta}{2} + k_1, & y_{\pm} &= k_2 \pm \frac{\Delta}{2} - k_1, \\ F &= \frac{N_1 N_2 C_1 C_2}{2k_1 k_2} \end{aligned} \right\} \quad (9a)$$

и F надлежит понимать в первом интеграле как функцию от x , а во втором — как функцию от y .

Теперь легко убедиться в том, что оба интеграла исчезают при $r_g \rightarrow \infty$. Пределы x_+ и x_- оба положительны, y_+ и y_- также имеют оба одинаковый (положительный или отрицательный) знак, поскольку k_1 должен был быть расположен вне описанного вокруг k_2 интервала Δ . Следовательно, пределы обоих интегралов будут одновременно стремиться к бесконечности, если положить

$$r_g x = u$$

и соответственно

$$r_g y = v$$

и устремить $r_g \rightarrow \infty$. Поэтому оба интеграла (9) действительно исчезают, а следовательно, обращается в нуль и вся правая часть (8). Итак, утверждавшаяся в (7) ортогональность доказана.

Та же самая выкладка приводит и к определению нормировочного множителя. В качестве условия нормировки мы потребуем по аналогии с (7)

$$\lim_{r_g \rightarrow \infty} \int d\tau \int_{\Delta} \psi_1 \psi_2^* dk_2 = 1. \quad (10)$$

Оно должно иметь место «для $k_1 = k_2$ », т. е. для k_1 , лежащих в интервале Δ . Если снова считать угловую часть нормированной на единицу, то надо потребовать для радиальной части R выполнения условия

$$\lim_{r_g \rightarrow \infty} \int r^3 dr \int_{\Delta} R_1 R_2^* dk_2 = 1. \quad (10a)$$

Мы снова используем тождество (8) и преобразования (8а, б) и (9). Но из двух интегралов (9) теперь обратится в нуль только первый, так как только его пределы x_+ и x_- имеют одинаковые знаки. Наоборот, знаки y_+ и y_- из (9а) будут теперь различными, и мы получим для достаточно больших r_g :

$$\int_{y_-}^{y_+} F(y) \sin r_g y \frac{dy}{y} = F(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \sin v \frac{dv}{v} = \pi F(0), \quad (10б)$$

где $F(0)$ означает значение $F(y)$ при $y=0$, следовательно, по (8в) при $k_1 = k_2 = k$. Согласно (9а) (мы пишем теперь $C_1 = C_2 = C$, $N_1 = N_2 = N_r$):

$$F(0) = \frac{N_r^2 C^2}{2k^2}. \quad (10в)$$

Уравнение (10а) требует

$$\frac{\pi C^2}{2k^2} N_r^2 = 1, \quad (11)$$

откуда, используя значение C из (7.33а):

$$N_r^2 = \frac{2k^2}{\pi} e^{\pi |n|} |\Gamma(n+l+1)|^2. \quad (11a)$$

Если мы присоединим сюда и нормировочный множитель угловой части собственной функции (3) [ср. (1.9.31)], то получим:

$$N^2 = N_r^2 N_{\theta}^2 = \frac{2(2l+1)(l-m)!}{4\pi^2 (l+m)!} e^{\pi |n|} |\Gamma(n+l+1)|^2 k^2. \quad (12)$$

Размерность N совпадает с размерностью k (обратная длина); напротив, в случае дискретного спектра N имело размерность обратной длины в степени $3/2$ [ср. (2.16)]. Это является непосредственным следствием отличия условия нормировки (10) от прежнего условия (1.7.13).

В заключение надо подчеркнуть, что наше рассмотрение условия нормировки, равно как и условия ортогональности, основывалось исключительно на асимптотическом поведении собственной функции. Мы получили благодаря этому существенное упрощение по сравнению с вычислениями в случае дискретного спектра с помощью теоремы Грина или, что то же самое, уравнения непрерывности для волномеханического заряда (ср. гл. 1, § 7). Относительно возможности перенесения этого метода на случай дискретного спектра см. дополнение 8.

Мы переходим теперь к вопросу об интенсивностях в непрерывном спектре водорода. Известны непрерывные спектры, примыкающие к границам серий Лаймана, Бальмера, Пашена и т. д. Мы ограничимся здесь непрерывным спектром, примыкающим к серии Лаймана. Он происходит за счёт переходов из состояния с $W > 0$ и волновой функцией ψ в основное состояние с энергией $W = W_1 = -R\hbar$ и собственной функцией ψ_1 . Распределение интенсивностей в этом спектре определяется из матричного элемента

$$M_q = \int q \psi_1 \psi^* d\tau.$$

Поскольку этот интеграл сходится сам по себе, нет нужды вводить «собственные дифференциалы» (ср. примечание 3 на стр. 108), как не было в этом нужды и при выводе условия ортогональности (2) между состояниями непрерывного и дискретного спектра.

Если пользоваться подробным способом записи (1.8.76), то

$$M_q = (1, 0, 0 | q | k, l, m). \quad (13)$$

Здесь числа слева означают

$$n = 1, \quad l = 0, \quad m = 0,$$

т. е. квантовые числа основного состояния; что же касается чисел справа, то k заменяет (мнимое в непрерывном спектре) главное квантовое число n [ср. (7.10)], а l и m являются угловыми квантовыми числами начального состояния. Но мы усматриваем сразу, что для дипольного излучения (не обращающийся в нуль матричный элемент) играют роль только наименьшие значения l и m [ср. правила отбора (5.2), которые имеют место и в этом случае], а именно следующие:

$$\left. \begin{aligned} q = z = r \cos \vartheta, \quad l = 1, \quad m = 0, \\ q = x \pm iy = r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \quad l = 1, \quad m = \pm 1. \end{aligned} \right\} \quad (13a)$$

Поэтому угловые части дадут:

$$\left. \begin{aligned} \text{в } M_z: \int \cos \vartheta \cdot 1 \cdot P_1 \cdot d\omega = \int \int \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{4\pi}{3}, \\ \text{в } M_x + iM_y: \int \sin \vartheta e^{i\varphi} \cdot 1 \cdot P_1 e^{-i\varphi} d\omega = \int \int \sin^2 \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{8\pi}{3}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Радиальные части в обоих случаях одинаковы, а именно:

$$Q = \int_0^{\infty} r R_1 R r^2 dr, \quad (15)$$

где

$$R_1 = e^{-\frac{z}{a}r} \left[\text{ср. начало } \S 3, \text{ равно как и таблицу 1 на стр. 80}; \right.$$

$$R = \frac{1}{(2kr)^2} \frac{1}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2}\right)^{n-2} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{-n-2} e^{-2ikr\omega} dx \quad (15a)$$

[ср. (7.28) с $l=1$, $\rho=2lkr$].

Сюда надо добавить ещё нормировочные множители N_1 и N для R_1 и соответственно R , а именно:

$$N_1^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \left(\text{ср. таблицу I стр. 80}; \right.$$

$$N^2 = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} e^{\pi|n|} |\Gamma(n+2)|^2 k^2, & q=z, l=1, m=0, \\ \frac{3}{4\pi^2} e^{\pi|n|} |\Gamma(n+2)|^2 k^2, & q=x+iy, l=1, m=1 \end{cases} \quad (15b)$$

[ср. уравнение (12)].

Теперь мы выполним в (15) интегрирование по r , именно:

$$\int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{z}{a}+2ik\omega\right)r} r dr = \left(\frac{Z}{a}+2lkw\right)^{-2},$$

для чего мы можем также написать, учитывая значение n :

$$(2lk)^{-2} \left(x + \frac{n}{2}\right)^{-2}.$$

Отсюда получается:

$$Q = \frac{(4lk^2)^{-2}}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2}\right)^{n-2} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{-n-2} \left(x + \frac{n}{2}\right)^{-2} dx. \quad (16)$$

Путь интегрирования окружает сначала точки $x = \pm \frac{1}{2}$. Мы стянем его, с одной стороны, к точке $x = -\frac{n}{2}$, которая является полюсом второго порядка, а с другой стороны, распространим до бесконечности, которая уже не будет, как это было в интеграле (15a) для R , существенно особой точкой и не даёт никакого вклада в интеграл, так как подинтегральное выражение убывает достаточно быстро. Вычет в полюсе $x = -\frac{n}{2}$ даёт:

$$Q = \frac{-1}{16k^4} \frac{d}{dx} \left[\left(x + \frac{1}{2}\right)^{n-2} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{-n-2} \right] = -\frac{4}{k^4} |n| \mu(n), \quad (16a)$$

где мы обозначили сокращённо через $\mu(n)$ действительную величину

$$\mu(n) = (n-1)^{n-2} (n+1)^{-n-2} = \mu(-n). \quad (16b)$$

Объединяя теперь выражения (14), (15b) и (16a), получаем:

$$M_s^2 = \frac{128}{3\pi} \left(\frac{a}{Z}\right)^2 |n|^2 e^{\pi|n|} |\Gamma(n+2)|^2 \mu^2(n). \quad (17)$$

То же самое значение получается и для

$$\frac{1}{2} |M_x + iM_y|^2 = M_x^2 = M_y^2. \quad (17a)$$

Вместо (17) можно написать, если учесть (11) из дополнения 7 и ввести значение μ из (16б):

$$M_x^2 = -\frac{256}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^3 \frac{|n|^9}{1 - e^{-2\pi|n|}} \frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}. \quad (18)$$

Это выражение мы сравним с матричным элементом из § 5 для дискретного лаймановского спектра. Предварительно нужно заметить, что собственная функция непрерывного спектра нормирована на интервал волновых чисел Δk (ср. стр. 110). В силу $k = \frac{Z}{a|n|}$ имеем:

$$\Delta k = -\frac{Z}{a} \frac{\Delta|n|}{|n|^2}. \quad (19)$$

Нормировка же в дискретном спектре отвечала интервалу квантового числа $\Delta l = 1$, в который действительно попадала как раз одна дискретная линия. Поэтому, для того чтобы провести сравнение с дискретным спектром, нам надо положить в (19) $\Delta|n| = 1$ и перемножить (18) и (19). Получается:

$$M_x^2 \Delta k = \frac{256}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^3 \frac{|n|^7}{1 - e^{-2\pi|n|}} \frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}. \quad (20)$$

Но это и есть наша прежняя формула для дискретного лаймановского спектра (5.19), если отвлечься от добавившегося в (20) знаменателя $1 - e^{-2\pi|n|}$, который, однако, на границе между дискретным и непрерывным спектром ($n = \infty$, $k = 0$) обращается в 1^1). Отсюда можно заключить, что оба спектра примыкают друг к другу с равной фотометрической плотностью²⁾. Это является общим, справедливым для всех непрерывных спектров законом³⁾, который особенно хорошо подтверждён на опыте для серии Бальмера. Аналитическая причина этого состоит в том, что дискретный и непрерывный спектры представляются существенно одинаковыми формулами, именно так, что n в точке сгущения непрерывного спектра стремится, оставаясь положительным целым числом, к бесконечности и продолжает своё изменение от примыкающей границы непрерывного спектра, начиная со значения $-i\infty$.

С методической точки зрения следует подчеркнуть, что вычисление матричных элементов в непрерывном спектре с помощью наших комплексных интегралов оказывается не более сложным, чем элементарные вычисления § 5 в дискретном спектре.

§ 9. ЗАДАЧА КЕПЛЕРА В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

В старой квантовой теории переменные в задаче Кеплера можно было разделить не только в полярных, но и в параболических координатах, как это было подчеркнута в § 7 гл. II т. I и показано в § 2 гл. VI т. I. Этот результат переносится и в волновую механику.

¹⁾ То же самое справедливо и для множителя, который будет рассмотрен в дополнении 8, ср. там формулу (19б).

²⁾ Впервые доказано: Y. Sugiura, Journ. de Phys. et le Radium 8, 113 (1927).

³⁾ Ср. в особенности R. W. Ditchburn, Proc. Roy. Soc. 143, 472 (1934); 150, 478 (1935); 157, 66 (1936); 157, 74 (1936), равно как и Zs. f. Phys. 107, 719 (1937).

Чтобы вписать волновое уравнение задачи Кеплера в параболических координатах, нам надо только преобразовать к этим координатам дифференциальное выражение $\Delta\psi$. Для этого воспользуемся выражением для элемента длины [уравнение (10) в § 2 гл. VI т. I]:

$$\left. \begin{aligned} ds^2 &= g_1 d\xi^2 + g_2 d\eta^2 + g_3 d\varphi^2, \\ g_1 &= \frac{\xi + \eta}{4\xi}, \quad g_2 = \frac{\xi + \eta}{4\eta}, \quad g_3 = \xi\eta. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

По общему правилу преобразования к любой системе ортогональных координат (относительно неортогональных координат см. дополнение 10)

$$\Delta\psi = \frac{1}{\sqrt{g_1 g_2 g_3}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \sqrt{\frac{g_2 g_3}{g_1}} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \sqrt{\frac{g_1 g_3}{g_2}} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \sqrt{\frac{g_1 g_2}{g_3}} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right\} \quad (2)$$

получим:

$$\Delta\psi = \frac{4}{\xi + \eta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{\xi + \eta}{4\xi\eta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\}. \quad (2a)$$

При этом параболические координаты ξ , η , φ следующим образом связаны с прямоугольными координатами x , y , z ($x = y = z = 0$ — общий фокус, ось x — общая ось параболоидов $\xi = \text{const}$ и $\eta = \text{const}$; угол φ отсчитывается вокруг оси x):

$$\left. \begin{aligned} x &= \frac{\xi - \eta}{2}, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad z = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\xi + \eta}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

или обратно

$$\xi = r + x, \quad \eta = r - x, \quad \text{tg } \varphi = \frac{z}{y}, \quad (3a)$$

и изменяются в пределах

$$0 < \xi < \infty, \quad 0 < \eta < \infty, \quad 0 < \varphi < 2\pi. \quad (3b)$$

В силу (2a) и (3) волновое уравнение (1.1) переходит в

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\eta} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{\mu W}{h^2} \frac{\xi + \eta}{2} + \frac{Z}{a} \right) \psi = 0, \quad (4)$$

где $a = \frac{h^2}{\mu e^2}$ и μ — масса электрона. Ему можно удовлетворить, положив

$$\psi = f_\xi f_\eta e^{im\varphi}, \quad (5)$$

если f_ξ и f_η удовлетворяют уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} + \left[\frac{\mu W}{2h^2} \xi - \frac{m^2}{4\xi} + \frac{1}{2} \left(\frac{Z}{a} + \beta \right) \right] \right\} f_\xi &= 0, \\ \left\{ \frac{d}{d\eta} \eta \frac{d}{d\eta} + \left[\frac{\mu W}{2h^2} \eta - \frac{m^2}{4\eta} + \frac{1}{2} \left(\frac{Z}{a} - \beta \right) \right] \right\} f_\eta &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Здесь β — «параметр разделения», который надо в дальнейшем определить или же снова исключить. Если положить

$$s = \begin{cases} \xi \\ \eta \end{cases}, \quad f = \begin{cases} f_\xi \\ f_\eta \end{cases}, \quad A = \frac{\mu W}{2h^2}, \quad B = \frac{1}{4} \left(\frac{Z}{a} \pm \beta \right), \quad C = -\frac{m^2}{4}, \quad (7)$$

то уравнения (6) приведутся к одинаковому виду:

$$\frac{d^2 f}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{df}{ds} + \left(A + \frac{2B}{s} + \frac{C}{s^2} \right) f = 0. \quad (8)$$

Это уравнение аналогично уравнению (1.3) в случае полярных координат и поэтому его можно рассматривать тем же способом.

Положим в соответствии с (1.5)

$$f = e^{-\frac{\rho}{2}} \vartheta, \quad \rho = \begin{cases} 2\sqrt{-As} & \text{в дискретном спектре} \\ & [\text{ср. (1.4a)}], \\ 2iks & \text{в непрерывном спектре} \\ & [\text{ср. (7.11)}] \end{cases} \quad (9)$$

и получим из (8) уравнение, аналогичное (1.7):

$$\vartheta'' + \left(\frac{1}{\rho} - 1 \right) \vartheta' + \left\{ \left(-\frac{1}{2} + \frac{B}{\sqrt{-A}} \right) \frac{1}{\rho} + \frac{C}{\rho^2} \right\} \vartheta = 0. \quad (10)$$

Обсуждение этого уравнения (поведение в нуле, двучленная рекуррентная формула, условие обрыва) проводится точно так же, как и в § 1. Между тем мы быстрее достигнем цели, если будем опираться на общие формулы дополнения 2. Действительно, наше уравнение (10) имеет вид уравнения (9) этого дополнения с

$$\left. \begin{aligned} h = 1, \quad A_2 = 1, \quad B_2 = 0, \quad A_1 = 1, \quad B_1 = -1, \\ A_0 = C, \quad B_0 = -\frac{1}{2} + \frac{B}{\sqrt{-A}}, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Поэтому, согласно (10) дополнения, характеристическое уравнение в нуле будет гласить:

$$\alpha^2 + C = 0,$$

и, следовательно, при учёте значения C из (7) и исключения отрицательного корня

$$\alpha = +\frac{m}{2}. \quad (12)$$

С другой стороны, условие обрыва рекуррентной формулы [(12) из дополнения 2] переходит согласно (11) и (12) в

$$\frac{m}{2} + n_i = -\frac{1}{2} + \frac{B}{\sqrt{-A}}, \quad n_i = \begin{cases} n_\xi \\ n_\eta \end{cases}, \quad (13)$$

где n_ξ и n_η — степени полиномов f_ξ и f_η . При сложении обоих содержащихся в (13) уравнений входящая в B постоянная разделения β исключается, и мы получаем:

$$m + n_\xi + n_\eta + 1 = \frac{Z}{2a\sqrt{-A}}. \quad (14)$$

Мы назовем аналогично (1.9a)

$$n = n_\xi + n_\eta + m + 1 \quad (14a)$$

главным квантовым числом. Оно складывается теперь из обоих «параболических квантовых чисел» n_ξ и n_η и «углового квантового числа» m . Уравнение (14) приводит, учитывая значение постоянной A в (7), к энергии

бальмеровского термина:

$$W = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2 \hbar^2 n^2}, \quad (15)$$

в согласии с уравнением (10) § 1.

Вместо того чтобы исключать параметр β , мы могли бы, естественно, вычислить его из (13). Мы получили бы тогда, учитывая значения B и W (вычитание записанных в (13) двух уравнений):

$$n_\xi - n_\eta = \frac{\beta}{2 \sqrt{-A}}, \quad \beta = \frac{n_\xi - n_\eta}{n} \frac{Z}{a}. \quad (16)$$

Согласно (9), (7) и (15) значение ρ в дискретном спектре даётся выражением

$$\rho = 2 \sqrt{-\frac{\mu W}{2 \hbar^2}} s = \frac{Z}{n} \frac{s}{a}$$

и, следовательно, для f_ξ и f_η в отдельности:

$$\rho_\xi = \frac{Z}{n} \frac{\xi}{a}, \quad \rho_\eta = \frac{Z}{n} \frac{\eta}{a}. \quad (17)$$

Кроме собственных значений, мы хотим найти также и вид собственных функций. Мы положим в дополнение к (12)

$$v = \rho^{\frac{m}{2}} w \quad (18)$$

и найдём дифференциальное уравнение для w из дифференциального уравнения (10) для v , в котором заменим $\frac{B}{\sqrt{-A}}$ с помощью (13) и C с помощью (7). Легко найдём:

$$\rho w'' + (m+1-\rho) w' + n_i w = 0, \quad n_i = \begin{cases} n_\xi \\ n_\eta \end{cases}. \quad (19)$$

Сравнение с (1.14) и (1.14a) показывает непосредственно, что мы имеем здесь дело с дифференциальным уравнением для m -й производной от полинома Лагерра L_{m+n_i} ; следовательно:

$$w = L_{m+n_i}^{(m)}. \quad (20)$$

Из (9), (18) и (20) получится теперь

$$f = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{\frac{m}{2}} L_{m+n_i}^{(m)}(\rho),$$

а из (5)

$$\psi = e^{-\frac{\rho_\xi + \rho_\eta}{2}} (\rho_\xi \rho_\eta)^{\frac{m}{2}} L_{m+n_\xi}^{(m)}(\rho_\xi) L_{m+n_\eta}^{(m)}(\rho_\eta), \quad (21)$$

или благодаря (17)

$$\psi = e^{-\frac{Z}{n} \frac{\xi + \eta}{2a}} \left(\frac{Z}{na}\right)^m (\xi \eta)^{\frac{m}{2}} L_{m+n_\xi}^{(m)}\left(\frac{Z}{n} \frac{\xi}{a}\right) L_{m+n_\eta}^{(m)}\left(\frac{Z}{n} \frac{\eta}{a}\right) e^{im\varphi}. \quad (22)$$

Эти формулы понадобятся нам в теории эффекта Штарка.

Не менее существенным является известное представление в параболических координатах непрерывного спектра для теории столкновений. Нас будет в особенности интересовать здесь такое решение волнового уравне-

ния, которое соответствует на больших расстояниях от ядра падающей плоской волне, на которую накладывается вследствие рассеяния на ядре излучаемая ядром сферическая волна. Эта задача входит в круг вопросов, объединяемых общим названием задачи об атоме водорода (одно ядро, взаимодействующее с одним электроном, который здесь, однако, не связан с ядром, а летит на большом расстоянии от него).

В качестве направления распространения первоначальной плоской волны мы примем положительное направление оси x . Волновая функция будет тогда аксиально-симметричной относительно оси x , т. е. не будет зависеть от φ . Для решения в форме (22) это означает, что мы должны положить $m = 0$. Поэтому оно упрощается и принимает вид:

$$\psi = e^{-\frac{Z}{n} \frac{\xi + \eta}{2a}} L_{n\xi} \left(\frac{Z}{n} \frac{\xi}{a} \right) L_{n\eta} \left(\frac{Z}{n} \frac{\eta}{a} \right). \quad (23)$$

Как мы показали в предыдущем параграфе, в случае непрерывного спектра главное квантовое число оказывается мнимым. Соотношения (7.9) и (7.10) между мнимым главным квантовым числом n , волновым числом k и кинетической энергией электрона на больших расстояниях от ядра W сохраняют силу и теперь. Мы можем поэтому положить в (23) $n = \frac{Z}{ika}$ и получить:

$$\psi = e^{-\frac{ik}{2}(\xi + \eta)} L_{n\xi}(ik\xi) L_{n\eta}(ik\eta), \quad (24)$$

где n_ξ и n_η связаны с n уравнением (14а):

$$n_\xi + n_\eta + 1 = n, \quad (24а)$$

и поэтому сами не могут быть чисто действительными. Отсюда следует, что функции Лагерра L в (24) являются теперь уже не полиномами, но трансцендентными решениями дифференциального уравнения Лагерра того типа, которые мы изучали в § 7. Их асимптотическое поведение определяется формулами (7.25) и (7.26). Учитывая (7.18), мы напишем в первом приближении (ρ стоит вместо $ik\xi$ или $ik\eta$; n вместо n_ξ или n_η):

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2}(K_1 + K_2) = \frac{(-\rho)^n}{\Gamma(n+1)} + \frac{(+\rho)^{-n} e^\rho}{\Gamma(-n)} \quad (25)$$

или, поскольку $\Gamma(1-n) = -n\Gamma(-n)$:

$$L_n(\rho) = \frac{(-\rho)^n}{\Gamma(1+n)} - \frac{n}{\rho} e^\rho \frac{(+\rho)^{-n}}{\Gamma(1-n)}. \quad (25а)$$

Подстановка (25) в (24) приводит к асимптотическому значению ψ_∞ собственной функции ψ :

$$\psi_\infty = e^{-\frac{ik}{2}(\xi + \eta)} \left\{ \frac{(-ik\xi)^{n_\xi}}{\Gamma(n_\xi + 1)} + \frac{(+ik\xi)^{-n_\xi - 1}}{\Gamma(-n_\xi)} e^{ik\xi} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{(-ik\eta)^{n_\eta}}{\Gamma(n_\eta + 1)} + \frac{(+ik\eta)^{-n_\eta - 1}}{\Gamma(-n_\eta)} e^{ik\eta} \right\}. \quad (26)$$

После выполнения умножения появляются четыре члена, которые мы охарактеризуем стоящими в них экспонентами:

$$1) e^{-\frac{ik}{2}(\xi + \eta)}; \quad 2) e^{+\frac{ik}{2}(\xi - \eta)}; \quad 3) e^{-\frac{ik}{2}(\xi - \eta)}; \quad 4) e^{+\frac{ik}{2}(\xi + \eta)}.$$

При этом ясно, что 1) возникает из произведения обоих первых, а 4) — из обоих последних членов в скобках. Для того чтобы вскрыть физический смысл этих четырёх членов, мы перепишем их с помощью (3) в координатах x и r и добавим к ним временной множитель $e^{-i\omega t}$:

$$e^{-i\omega t}(e^{-ikr}, e^{+ik\omega}, e^{-ik\omega}, e^{+ikr}).$$

Мы видим, что член 2) отвечает плоской волне, распространяющейся в положительном направлении оси x ; член 4) — излучаемой ядром сферической волне. Эти два члена как раз и соответствуют нашей постановке задачи. Напротив, член 1) отвечает сходящейся к ядру сферической волне, а член 3) — плоской волне, распространяющейся в отрицательном направлении оси x . Оба эти члена несовместимы с нашей постановкой задачи. Мы должны так выбрать наше решение, чтобы удалить из него эти два члена. Выпишем множители, с которыми появляются эти члены при вычислении (26):

$$1) \frac{(-ik\xi)^{n_\xi} (-ik\eta)^{n_\eta}}{\Gamma(n_\xi + 1) \Gamma(n_\eta + 1)};$$

$$3) \frac{(-ik\xi)^{n_\xi} (+ik\eta)^{-n_\eta - 1}}{\Gamma(n_\xi + 1) \Gamma(-n_\eta)}.$$

Эти множители обращаются в нуль тогда и только тогда, когда мы положим $n_\xi + 1$ равным нулю или целому отрицательному числу:

$$n_\xi + 1 = -g, \quad g \geq 0. \quad (27)$$

Тогда первая фигурная скобка в (26) вырождается в

$$\frac{(+ik\xi)^g}{\Gamma(g + 1)} e^{ik\xi}.$$

Однако и этот член все ещё оказывается несовместимым с условиями нашей задачи, если только $g > 0$, поскольку при этом ξ^g становится бесконечно большим для $\xi \rightarrow \infty$. Мы должны, следовательно, положить далее

$$g = 0, \quad n_\xi = -1 \text{ и, согласно (14а), } n_\eta = n. \quad (28)$$

Легко понять, что такой выбор n_ξ и n_η эквивалентен специальному выбору параметра разделения β в (16):

$$\beta = -\left(\frac{1}{n} + 1\right) \frac{Z}{a} = -ik - \frac{Z}{a}.$$

Со значением $n_\xi = -1$ формула (7.21) даёт

$$L_{-1}(\rho) = 1 + \frac{\rho}{1!} + \frac{\rho^2}{2!} + \dots = e^\rho.$$

Следовательно, оба первых множителя в (24) дают вместе

$$e^{-i\frac{k}{2}(\xi+\eta)} e^{+ik\xi} = e^{+i\frac{k}{2}(\xi-\eta)} = e^{ik\omega},$$

и (24) переходит с учётом (28) в¹⁾

$$\psi = e^{ik\omega} L_n(ik\eta). \quad (29)$$

¹⁾ Впервые выведено в работах: W. Gordon, Zs. f. Phys. 48, 180 (1928) и G. Temple, Proc. Roy. Soc. 121, 673 (1928). Более подробно обсуждено автором в App. d. Phys. 11, 257 (1931).

Одновременно (25а) приводит к следующему асимптотическому представлению для (29):

$$\psi_{\infty} = \frac{(-ik\eta)^n}{\Gamma(1+n)} e^{ikx} - n \frac{(+ik\eta)}{\Gamma(1-n)} \frac{e^{ikr}}{ik\eta}. \quad (30)$$

Мы пришли тем самым к чрезвычайно простому и ясному результату: первый член в (29) представляет невозмущённую падающую волну, а второй описывает, как влияет на неё рассеяние (диффракция) на ядре. Мы увидим в гл. V, что эта формула заключает в себе классическую теорию резерфордского рассеяния α -частиц на ядрах.

Для других применений (непрерывный рентгеновский спектр и т. д.) является целесообразным придать (29) форму, не зависящую от выбора системы координат: мы будем теперь считать, что плоская волна падает не в направлении оси x , а в произвольном направлении некоторого волнового вектора \mathbf{k} . Мы должны тогда заменить

$$e^{ikx} \text{ на } e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$$

и, согласно представлению (3а) для η , одновременно

$$k\eta \text{ на } kr - (\mathbf{k}\mathbf{r}).$$

Если мы добавим ещё нормировочный множитель N , то обобщение (29) будет иметь вид:

$$\psi = Ne^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})} L(i\{kr - (\mathbf{k}\mathbf{r})\}). \quad (31)$$

Придавая \mathbf{k} всевозможные значения, получим из (31) систему нормированных и взаимно ортогональных собственных функций, каждая из которых представляет асимптотическую плоскую волну. Эта система будет также и полной, если мы добавим к ней рассмотренные в начале этого параграфа собственные функции дискретного спектра.

Сравним её с системой истинных плоских волн

$$N_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}, \quad (31a)$$

для которых, как следует из (7) дополнения 8, нормировочный множитель имеет вид:

$$N_0^2 = \frac{1}{(2\pi)^3},$$

и попробуем определить из этого нормировочный множитель N в (31). Асимптотическое поведение наших функций, от которого, согласно замечанию на стр. 110, только и зависит определение N , такое же, с точностью до множителей, как и у системы (31а). Именно, из (30), если мы опустим асимптотически пропадающий второй член (n чисто мнимо), получается [ср. также (7) дополнения 7]:

$$\psi(\mathbf{k}) \psi^*(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{(-i)^n (i)^{-n}}{\Gamma(1+n) \Gamma(1-n)} = \frac{e^{-i\pi n} \sin \pi n}{\pi n} = \frac{1 - e^{-2i\pi n}}{2i\pi n}. \quad (31б)$$

Нам надо, следовательно, сравнить

$$N^2 \psi(\mathbf{k}) \psi^*(\mathbf{k}) = N^2 \frac{1 - e^{-2i\pi n}}{2i\pi n}$$

с

$$N_0^2 e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r})} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r})} = \frac{1}{(2\pi)^3}.$$

Мы заключаем отсюда, что

$$N^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{in}{1 - e^{-2i\pi n}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{|n|}{1 - e^{-2\pi |n|}}. \quad (32)$$

Естественно, что мы можем переписать записанное в параболических координатах решение (29) в полярных координатах, т. е. его можно построить из рассматривавшихся в § 7 собственных функций. Однако его представление, которое мы приведём здесь без вывода, будет значительно более сложным:

$$\psi = - \sum_0^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\Gamma(n+l+1)}{\Gamma(n+1)} R_l(2lkr) P_l(\cos \vartheta).$$

Здесь R_l — определённая (7.27) радиальная собственная функция, а ϑ означает угол, который образует с направлением распространения падающей волны линия, проведённая из ядра в точку наблюдения.

§ 10. ОБЩИЕ СООБРАЖЕНИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО СПЕКТРАЛЬНЫХ СЕРИЙ ДЛЯ СЛУЧАЯ ОДНОГО ОПТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОНА И ОТНОСИТЕЛЬНО СИММЕТРИИ АТОМНЫХ ОБОЛОЧЕК

Отличие, например, щелочных металлов от водорода состоит в том, что вместо кулоновского поля действует силовое поле общего вида. Мы будем считать его, как и в § 4 гл. VII т. I, приблизительно центрально-симметричным и объединим в нём действующее на «внешний электрон» притяжение со стороны ядра и отталкивание со стороны остальных составляющих атом электронов. Выяснение вопроса об определении этого центрально-симметричного поля отложим до гл. X. Упомянем только, что простейшим методом является статистический метод Томаса—Ферми, а наиболее плодотворным — метод Хартри—Фока. Здесь мы оставим это поле неопределённым и обозначим его потенциал через $V(r)$. Отличие потенциала $V(r)$ от кулоновского потенциала $\frac{Ze^2}{r}$ можно обычно трактовать как *экранирование* ядра. Мы покажем далее, на стр. 127, на примере K -оболочки тяжёлых атомов, как возникает такое экранирование с точки зрения волновой механики.

В то время как, строго говоря, волновое уравнение для атома с Z электронами относится к $3Z$ -мерному конфигурационному пространству, после введения $V(r)$ мы будем писать его приближённо, как для одноэлектронной задачи, а именно [ср. (1.1)] в виде:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} [W - V(r)] \psi = 0. \quad (1)$$

Под единственным электроном, к которому относится (1.1), мы будем подразумевать электрон, ответственный за расположенную в видимой области часть спектра, например в случае щелочных металлов — валентный электрон, в общем же случае — тот электрон, который находится на возбуждённом уровне перед испусканием света. Уравнение (1) допускает разделение переменных (1.2), т. е. имеет решение вида:

$$\psi = R P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (2)$$

При этом радиальная часть удовлетворяет уравнению, аналогичному (1.3):

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [W - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0, \quad (3)$$

однако решение этого уравнения уже нельзя, как в случае водорода, найти элементарным путём, возникает необходимость, вообще говоря, в численном интегрировании.

Как и в случае водорода, выбор решения в форме (2) приводит к правилам отбора:

$$l \rightarrow l \pm 1, \quad m \begin{cases} \nearrow m \\ \searrow m \pm 1 \end{cases}. \quad (4)$$

В то время как правило отбора для m играет роль только в магнитном поле, правило отбора для l определяет комбинационные возможности термов. Мы сохраним обозначения старой теории, так что имеем для разных l :

$$\begin{array}{l} \text{терм: } s \quad p \quad d \quad f \dots \\ l = \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \dots \end{array}$$

Правило отбора (4) обосновывает предпочтительное появление следующих комбинаций термов (ср. т. I, гл. VII, § 1):

Главная серия	Первая побочная серия	Вторая побочная серия
$s - p$	$p - d$	$p - s$

Кроме угловых квантовых чисел l и m , нам надо рассмотреть и радиальное квантовое число n_r , которое задавалось в случае водорода степенью полинома от r . Такое определение становится теперь неприменимым, поскольку уравнению (3), вообще говоря, нельзя удовлетворить полиномиальным решением. Однако сохраняет силу другое определение n_r , именно, как числа нулей радиальной функции R , расположенных между точками 0 и ∞ (ср. § 3), n_r принимает значения

$$n_r = 0, 1, 2, \dots$$

Из чисел n_r и l мы образуем, как и в случае водорода, *главное квантовое число*

$$n = n_r + l + 1. \quad (5)$$

Однако, в то время как в случае водорода термы с одинаковыми главными квантовыми числами совпадали (в пренебрежении релятивистскими поправками), здесь они расщепляются, и притом тем больше, чем больше отличие данного атома от атома водорода. Это обстоятельство обуславливает макроскопическую различимость s -, p -, d -термов и отличие первой и второй побочных серий. Покажем это количественно в простейшем случае.

Положим

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{M}{r^2}, \quad (6)$$

т. е. добавим к кулоновскому потенциалу (заэкранированному до заряда, равного единице) поправочный член, который чисто схематически отвечает электрическому моменту ядра¹⁾ (M обладает размерностью $e^2 \times$ длина),

¹⁾ На языке старой атомной теории это означает: внешний электрон индуцирует в атомном остатке поляризацию, ось которой совпадает с направлением на внешний электрон. Вклад этого «поляризационного эффекта» в поправку Ридберга δ_1 и сравнение его с вкладом «эффекта экранирования» обсуждались для двухэлектронных систем Бете, Квантовая механика простейших систем, М.—Л., 1934 (см. также Bethe, Handb. d. Phys. 24, 1, стр. 346).

причём направление момента считается совпадающим с направлением радиусавектора r ; можно рассматривать уравнение (6) и как разложение настоящего потенциала в ряд по отрицательным степеням r , оборванное на втором члене. Соответствующее уравнение (3) мы запишем, как и в случае (1.3):

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(A + \frac{B}{2r} + \frac{C}{r^2} \right) R &= 0, \\ A = \frac{2m}{\hbar^2} W, \quad B = \frac{me^2}{\hbar^2}, \quad C = -l(l+1) - M. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Отщепляя множитель, определяющий асимптотическое поведение [ср. (1.4a) и (1.5)], т. е. полагая

$$R = e^{-\frac{\rho}{2}} v, \quad \rho = 2\sqrt{-A}r,$$

мы получим для v дифференциальное уравнение, заменяющее (1.7):

$$\rho^2 v'' + \rho(2 - \rho) v' + \left\{ C + \left(\frac{B}{\sqrt{-A}} - 1 \right) \rho \right\} v = 0. \quad (8)$$

Оно может быть элементарно проинтегрировано по схеме, развитой в дополнении 2. Согласно уравнениям (9), (10) и (11) этого дополнения мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} A_2 = 1, \quad B_2 = 0, \quad A_1 = 2, \quad B_1 = -1, \quad A_0 = C, \\ B_0 = \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1, \quad \alpha(\alpha + 1) + C = 0, \quad \alpha + n_r = \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

В последнем уравнении мы написали n_r вместо n , так как это число действительно определяет степень рассматриваемого полинома, а следовательно, и радиальное квантовое число. (Более общее определение n_r через число нулей R , о котором шла речь выше, оказывается здесь излишним.) Решение квадратного уравнения (9) относительно α даёт при учёте значения C из (7):

$$\alpha = l + \delta_l, \quad \delta_l = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + M} - \left(l + \frac{1}{2} \right). \quad (10)$$

Если рассматривать M как малую поправку, то разложение корня в ряд даёт:

$$\delta_l = \frac{M}{2l+1}. \quad (10a)$$

Второй член в (9) переходит теперь благодаря (10) в

$$\frac{B}{\sqrt{-A}} = l + \delta_l + n_r + 1 = n + \delta_l.$$

Наконец, раскрывая значения постоянных B и A в (7) [ср. также (1.10)], получаем:

$$W = -\frac{Rh}{(n + \delta_l)^2}, \quad R = \frac{2\pi^2 me^4}{\hbar^3}, \quad (11)$$

т. е. ридберговский вид термина вместо бальмеровского (ср. т. I, гл. VII, § 2). То обстоятельство, что δ_l зависит от l , обуславливает расщепление серий термов s , p , d , ... Специальная форма (10a) для δ_l показывает непосредственно, что термы становятся тем более водородоподобными, чем больше l : «поправка Ридберга» δ_l в f -терме меньше, чем в d -терме и т. д. Этот полученный нами в специальном предположении результат справедлив, как известно, и в общем случае.

Мы обратим здесь наше внимание на тесный параллелизм между волновой механикой и старой квантовой теорией. В дополнении 11 к т. I мы, как и в (6), разложили атомное поле V в ряд по степеням $\frac{1}{r}$ и вычислили радиальный фазовый интеграл в различных приближениях. Второе приближение, которое отвечало обрыву разложения на члене $\frac{1}{r^2}$, приводило и там к ридберговскому терму. Для того чтобы получить в квантовой механике терм в форме Ритца, надо оставить в (6) старшие члены.

Мы подчёркивали уже в § 3, что в случае водорода s -термы с $l=0$ оказывались сферически симметричными, а p -, d -термы с $l>0$ — аксиально-симметричными.

Это полностью переносится и на сложные атомы, поскольку характер симметрии собственной функции (2) задаётся угловой частью $P_l^m e^{im\varphi}$, которая совпадает с угловой частью в случае водорода. Так же как и собственные функции в s -состояниях, сферической симметрией обладают и получающиеся из них плотности заряда ρ и отвечающие им силовые поля. Мы можем заключить отсюда, что столкновения, которые определяются действиями силовых полей, происходят, как и в классической кинетической теории газов, аналогично соударениям изотропных шаров, если, как, например, в случае щелочных металлов, основное состояние является s -термом.

Наоборот, прежняя атомная модель обладала симметрией не шара, а диска, например в основном состоянии щелочных металлов, когда во всяком случае размеры атома в плоскости обращаемого электрона должны были быть много большими, чем в перпендикулярном направлении.

Опыт Штерна — Герлаха даёт нам средство для ориентирования этих мнимых атомных дисков параллельно друг другу. Действительно, если бы парамагнитный момент был (как магнетон для основного состояния атома водорода и щелочных металлов) обусловлен обращением электрона (на самом деле он возникает за счёт спина электрона), то магнитная ось должна была быть расположена перпендикулярно к плоскости орбиты и устанавливаться параллельно или антипараллельно силовым линиям внешнего магнитного поля.

Сюда примыкает опыт Фразера¹⁾ с каналовыми лучами водорода. H^+ -частицы, которые как протоны обладали и по старой теории сферически симметричным полем, а потому не могли помочь решению спора между волновой механикой и старой теорией, вытягивались электрическим полем непосредственно перед вхождением в измерительное пространство. Нейтральные H -частицы падали на термостолбик и с его помощью считались гальванометрически. По дороге они подвергались действию магнитного поля, силовые линии которого были параллельны направлению каналовых лучей. Согласно старой теории при включении поля соударения частиц в пучке должны были становиться более вероятными, и потому показание гальванометра должно было уменьшиться по сравнению со случаем отсутствия поля, так как в первом случае все H -атомы остаточного газа (H_2 или аргон) должны были бы поворачиваться к пучку полной поверхностью диска, в то время как в отсутствии поля благодаря случайной ориентации атомов в качестве сечения столкновения должна была бы выступать только часть поверхности диска. В действительности, однако, не было обнаружено разницы в отклонениях с полем и без поля. Это согласуется с новой теорией, по которой H -атом сферически симметричен, и поэтому ориентация в магнитном поле не может повлиять на эффективное сечение столкновений.

¹⁾ R. Fraser, Proc. Roy. Soc. 114, 212 (1927).

Уже в своей первой основной работе о теории «пространственного квантования в магнитном поле» Штерн¹⁾ заключил из господствовавших тогда модельных представлений, что магнитная ориентация атомов должна была приводить к двойному лучепреломлению, которое, если бы оно действительно существовало, должно было бы проявиться в бесчисленном количестве прежних исследований, например с парами натрия. Это двойное лучепреломление не должно было зависеть от напряжённости магнитного поля, и его появления следовало бы ожидать и на больших спектральных расстояниях от мест аномальной дисперсии. Действительно, когда все атомы, например, в парах натрия магнитно ориентированы и мы пропустим световой луч перпендикулярно к направлению магнитного поля, то, согласно представлениям о симметрии типа диска, два направления электрических колебаний, на которые можно разложить естественное световое колебание, будут расположены относительно атома по-разному: одно, параллельное магнитным силовым линиям, будет направлено перпендикулярно к плоскости орбиты, а второе будет лежать в этой плоскости. Они должны были бы вызвать различные реакции валентного электрона и обладать поэтому различными скоростями распространения. Иными словами, должно было наступить магнитное двойное лучепреломление, не зависящее от силы магнитного поля. То, что этого на самом деле не происходит, было доказано различными путями. Последние и наиболее надёжные опыты были проведены Шютцем²⁾ с полностью отрицательным результатом. Мы уже знаем, как надо это истолковать: отрицательный результат говорит не против магнитной ориентации электронных осей, которая объективно доказана опытом Штерна — Герлаха, но против дискообразной симметрии атома; в предположении шаровой симметрии атомов натрия в *s*-состоянии противоречие устраняется.

Но шаровая симметрия реализуется также и для всех замкнутых оболочек³⁾. Отвлекаясь от введённого в т. I, гл. III, § 4 четвёртого или «спинового квантового числа» m_s , которое можно систематически рассмотреть только в теории Дирака (гл. IV), и ограничиваясь здесь тремя «орбитальными квантовыми числами» n , l и m , определим, что замкнутая оболочка образуется электронами всех возможных состояний m , которые при заданных числах n и l возможны согласно принципу Паули. Вследствие условия

$$-l \leq m \leq +l$$

число таких электронов равно $2l + 1$ [оно увеличилось бы вдвое, до значения $2(2l + 1)$, из-за четвёртого квантового числа $m_s = \pm \frac{1}{2}$]. Выпишем собственную функцию ψ и плотность заряда ρ для какого-либо из этих электронов в нашем приближении (2), в котором, как мы уже отмечали выше, взаимодействие с остальными электронами должно учитываться в суммарном виде через потенциал $V(r)$:

$$\psi = R P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad \rho = R^2 [P_l^m(\cos \vartheta)]^2. \quad (12)$$

Здесь R зависит от n и l , но не от m . Что же касается шаровых функций P , то мы будем считать их нормированными на единицу, т. е. будем считать, отступая от обычной нормировки, что P^2 включает в себя множитель [ср. (I. 9.31)]:

$$N^2 = \frac{2l + 1}{4\pi} \frac{(l - m)!}{(l + m)!}. \quad (13)$$

¹⁾ Stern, Zs. f. Phys. 7, 249 (1921).

²⁾ W. Schütz, Zs. f. Phys. 38, 853 (1926).

³⁾ A. Unsöld, Ann. d. Phys. 82, 355 (1927).

Что же касается нормировки радиальной части R , которая не зависит от m , мы будем считать её включённой в R . Если теперь просуммировать (12) по всем $2l+1$ электронам заполненной оболочки, то, вынося за знак суммы не зависящий от m множитель R^2 , мы получим:

$$\sum \rho = R^2 \sum_{m=-l}^{+l} [P_l^m(\cos \vartheta)]^2. \quad (14)$$

Такая просуммированная плотность совпадает в нашем приближении с плотностью заряда, отвечающей всей замкнутой оболочке. Наше утверждение состоит в том, что она не зависит от ϑ , т. е. является сферически симметричной.

Доказательство основывается на одной давно известной теореме теории шаровых функций, именно на теореме сложения, которую мы приведём здесь в следующей простой форме. Если ϑ , φ и ϑ' , φ' — две точки на единичной сфере и Θ — их сферическое расстояние, так что

$$\cos \Theta = \cos \vartheta \cos \vartheta' + \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(\varphi - \varphi'),$$

то

$$P_l(1) P_l(\cos \Theta) = \sum_{m=-l}^{+l} P_l^m(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta') e^{im(\varphi - \varphi')}. \quad (15)$$

Если мы положим здесь $\vartheta = \vartheta'$, $\varphi = \varphi'$, то $\cos \Theta = 1$ и получится:

$$P_l^2(1) = \sum_{-l}^l [P_l^m(\cos \vartheta)]^2. \quad (15a)$$

Но правая часть этой формулы совпадает с правой частью (14). Следовательно, наше распределение заряда (14) действительно оказывается не зависящим от ϑ , т. е. сферически симметричным.

Если мы откажемся теперь от «нормировки на 1» и перейдём к обычной нормировке, в которой $P_l(1) = 1$, то правую часть (15) надо будет помножить почленно на нормировочный множитель N^2 из (13); соответственно в левой части возникнет тот же самый множитель для $m = 0$, т. е. множитель $\frac{2l+1}{4\pi}$. Таким образом, (15) перейдёт в

$$P_l(\cos \Theta) = \sum_{-l}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta') e^{im(\varphi - \varphi')}. \quad (16)$$

Если отказаться от единообразного определения P_l^m для отрицательных и положительных m , которое было введено в (1.3.166), то из (16) получится обычная действительная форма теоремы сложения:

$$P_l(\cos \Theta) = P_l(\cos \vartheta) P_l(\cos \vartheta') + \\ + 2 \sum_1^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta') \cos m(\varphi - \varphi'). \quad (17)$$

Преимущества используемого нами отрицательного m , равно как и нашей нормировки на 1, выясняются при сравнении (15) и (17).

Наша теорема сохраняет свою справедливость и при учёте четвёртого квантового числа m_s , когда суммирование производится не только по всем

значениям m , но и при фиксированных l и m по обоим значениям $m_s = \pm \frac{1}{2}$. В формуле (14) надо добавить тогда в том же приближении, что и до сих пор, множитель 2.

Без дальнейшего понятно, в сколь сильной степени должно упрощать наличие сферической симметрии все рассмотрения химических свойств замкнутых оболочек. Например, можно указать на построенную Льюисом модель восьмизлектронных оболочек (статический октет). Последняя также обладает благодаря регулярному кубическому построению высокой степенью симметрии, так что, например, дипольный и квадрупольный моменты распределения заряда обращаются в нуль. Но при этом остаются старшие мультипольные моменты, влияние которых на больших расстояниях пытались, между прочим, использовать для объяснения сил, сдерживающих кристаллическую решётку. Напротив, наша теорема утверждает, что как для оболочек из восьми электронов, так и для любых других замкнутых оболочек все мультипольные моменты произвольного порядка обращаются в нуль.

Эта теорема оказывается справедливой, однако, не только в рассмотренном здесь одноэлектронном приближении, в котором взаимодействие электронов представляется схематически потенциалом $V(r)$, но справедлива и точно при полном учёте всех потенциалов взаимодействия $V(r_{ik})$. Мы не будем приводить доказательства этого утверждения, но сошлёмся на аналогичное уточнение в конце § 3 гл. III, где будет говориться о введении точных квантовых чисел M, L для всей электронной системы вместо неточных квантовых чисел m, l для каждого электрона, используемых в настоящем параграфе.

Из сферической симметрии замкнутых оболочек следует далее, что они не могут обладать парамагнитным моментом, так как для них будет только $j_r = j_\phi = 0$ [уравнение (6.17)], но в пределе $H = 0$ и в сумме по всем m также и $j_\varphi = 0$ [уравнение (6.20)]. Отсюда следует, что атомы с замкнутыми оболочками должны быть диамагнитными. Их диамагнитную восприимчивость можно вычислять с помощью той же формулы Ланжевена, что и для водорода, если обобщить соответствующим образом смысл электрического момента инерции Θ ; она основывается, как и для водорода, на ларморовой прецессии. Так как и молекулы обладают, как правило, замкнутыми электронными конфигурациями, то и они являются, за малыми исключениями (O_2, NO), диамагнитными.

Иначе обстоит дело для незамкнутых оболочек. Здесь азимутальные электрические токи, вызванные отдельными электронами, не компенсируются. Они ориентируются под действием магнитного поля и приводят к результирующему парамагнитному моменту, который измеряется целым числом боровских магнетонов. Его частично компенсирует диамагнитный момент, обусловленный ларморовой прецессией. Доказательство проводится совершенно аналогично выполненному в § 6, в особенности в (6.21).

Рассмотрим несколько подробнее специальный случай замкнутой, т. е. заполненной двумя электронами, K -оболочки. В начале развития рентгеновской спектроскопии вычисления проводили с постоянной экранирования, меняющейся скачком от $s = 0$ (внутри) до $s = 2$ (вне K -оболочки). Иными словами, потенциал ψ , действующий на некоторый мысленный заряд 1^1 , пола-

¹) Например, налетающий извне электрон или протон. Этому не противоречит, что, как установил ещё Мозли, эффективное значение постоянной экранирования равно единице для испускания K_α -линии (ср. т. I, гл. IV, § 4). В этом случае, как и при определении термина в § 7 гл. IV т. I, речь идёт о незаполненной, т. е. ионизированной или ионизирующей, K -оболочке.

гали имеющим вид:

$$V = \begin{cases} \frac{eZ}{r} & \text{внутри,} \\ \frac{e(Z-2)}{r} & \text{вне.} \end{cases} \quad (18)$$

Посмотрим теперь, как получается этот скачкообразный переход из волновой механики. Волномеханически потенциал складывается из потенциала ядра

$$V_1 = \frac{Ze}{r} \quad (19)$$

и потенциала электронного облака

$$V_2 = \int \frac{\rho d\tau'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \vartheta'}}. \quad (20)$$

Здесь ρ — плотность заряда в точке интегрирования $(r', \vartheta', \varphi')$ и $d\tau' = r'^2 dr' \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi'$; углы ϑ', φ' относятся к оси ядро — точка наблюдения. Зависимость ρ от координат находится из водородной собственной функции в основном состоянии:

$$\psi = \left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{Z}{a}r},$$

следовательно,

$$\rho = -\frac{2e}{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^3 e^{-\frac{2Z}{a}r}.$$

Множитель 2 отвечает двум электронам в K -оболочке; от оболочек L, M, \dots мы можем отвлечься. Мы получаем из (20):

$$V_2 = -4e \left(\frac{Z}{a}\right)^3 \int_0^{\infty} e^{-\frac{2Z}{a}r'} r'^2 dr' \int_0^{\pi} \frac{\sin \vartheta' d\vartheta'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \vartheta'}}.$$

Интеграл по ϑ' оказывается равным

$$\frac{r+r'-|r-r'|}{rr'} = \begin{cases} \frac{2}{r}, & r' < r, \\ \frac{2}{r'}, & r < r'. \end{cases}$$

Отсюда следует:

$$\begin{aligned} V_2 &= -8e \left(\frac{Z}{a}\right)^3 \left\{ \int_0^r \frac{r'^2}{r} e^{-\frac{2Z}{a}r'} dr' + \int_r^{\infty} r' e^{-\frac{2Z}{a}r'} dr' \right\} = \\ &= \frac{e}{r} \left(\frac{2Z}{a}\right)^3 \left\{ \frac{d^2}{d\alpha^2} \frac{e^{-\alpha r} - 1}{\alpha} + r \frac{d}{d\alpha} \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} \right\}_{\alpha = \frac{2Z}{a}} = \\ &= \frac{e}{r} \left[-2 + 2e^{-\frac{2Z}{a}r} \left(1 + \frac{Z}{a}r\right) \right]. \end{aligned}$$

Вместе с (19) это даёт:

$$V = \frac{e}{r} \left[Z - 2 + 2e^{-\frac{2Z}{a}r} \left(1 + \frac{Z}{a}r\right) \right]. \quad (21)$$

следовательно,

$$V = \begin{cases} \frac{eZ}{r}, & r \rightarrow 0, \\ \frac{e(Z-2)}{r}, & r \rightarrow \infty, \end{cases}$$

т. е. действительно получаются предельные значения (18); формула (21) даёт искомый непрерывный переход между ними.

Мы закончим указанием на введённые Хартри ¹⁾ атомные единицы.

В предыдущих вычислениях r появлялось, что естественно из соображений размерностей, в основном в комбинации $\frac{r}{a}$. Мы можем устранить знаменатель a , если положим, что все длины (x, y, z и т. д.) измеряются в единицах радиуса водорода

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Мы пойдём, однако, далее и будем, следуя Хартри, измерять также и все массы и заряды в единицах массы и заряда электрона. Но при $a = 1, m = 1, e = 1$ написанная выше формула требует также и $\hbar = 1$. Это значит, что за единицу действия надлежит выбрать \hbar . Тогда одновременно (из-за $e = 1, a = 1$) окажется, что единица энергии будет равна $\frac{e^2}{a}$, т. е. удвоенному потенциалу ионизации водорода. Поскольку тем самым энергия $|W_1| = Rh$ основного состояния водорода окажется равной $\frac{1}{2}$, то $Rh = \frac{1}{2}$ и, следовательно, так как $\hbar = 1$:

$$R = \frac{1}{4\pi}. \quad (22)$$

Из значения постоянной тонкой структуры α вместе с $e = 1, \hbar = 1$ следует $c = \frac{1}{\alpha}$. Единица скорости составляет ac , т. е. совпадает со скоростью электрона в основном состоянии водорода [ср. т. I, гл. II, § 2, уравнение (8)]. Отсюда получается в качестве единицы времени

$$\frac{a}{ac} = \frac{\hbar^2}{me^4} \sim 2,3 \cdot 10^{-17} \text{ сек.} \quad (23)$$

Уравнение Шредингера для водорода принимает при использовании этих единиц вид:

$$\Delta\psi + 2\left(W + \frac{1}{r}\right)\psi = 0, \quad (24)$$

а уравнение, содержащее время, согласно (1.6.9):

$$\Delta u + 2i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{2}{r} u = 0. \quad (25)$$

Естественно, что при образовании дифференциального выражения Δ в этих уравнениях надлежит дифференцировать не по длинам x, y, z , но по безразмерным переменным

$$x_0 = \frac{x}{a}, \quad y_0 = \frac{y}{a}, \quad z_0 = \frac{z}{a}. \quad (26)$$

¹⁾ D. R. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. 24, 89 (1928).

**§ 11. ТЕОРИЯ ПОЛОСАТЫХ СПЕКТРОВ.
ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ И ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ
ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ**

Мы ограничимся в этом параграфе двухатомными молекулами, подобными, например, HCl , H_2 , ... и будем представлять их с помощью «модели гантели»: две массы на концах невесомой связи. Связь будем сначала считать твёрдой, а потом деформируемой. В первом случае мы получим чистые вращательные полосы, а во втором случае к ним добавляются колебания связи.

Вращательные полосы расположены в далёкой инфракрасной области (например, при 100μ , ср. т. I, гл. IX, § 2) и построены из простой последовательности почти равноотстоящих линий. Они представляют собой основную форму проявления существования молекулы. Их основным элементом является терм Десландра. По старой квантовой теории он имел вид (ср. т. I, гл. IX, § 1):

$$\frac{W}{h} = Bm^2, \quad m = 0, 1, 2, \dots; \quad (1)$$

напротив, по волновой механике [гл. I, уравнение (5.19)]

$$\frac{W}{h} = Bj(j+1), \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Величина B в обоих случаях имеет значение

$$B = \frac{h}{8\pi^2 J}, \quad (3)$$

где J — момент инерции относительно оси, перпендикулярной к оси молекулы и проходящей через её центр инерции [ср. также ниже (15)]. Множитель $j(j+1)$ возник в (2) из дифференциального уравнения шаровых функций, соответствующая собственная функция имела, согласно (1.5.20), вид:

$$\psi = P_j^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (4)$$

Из термина (2) получается для перехода $j' \rightarrow j$ частота

$$\nu = B \{j'(j'+1) - j(j+1)\}. \quad (5)$$

Однако волновая механика приводит [см. (1.9.35)] к правилу отбора:

$$j' = j \pm 1, \quad (6)$$

где положительный знак отвечает испусканию, а отрицательный (в случае вращательных полос) поглощению. Мы ограничимся первым и получим из (5)

$$\nu = 2B(j+1). \quad (7)$$

Напротив, из (1) с $m' = m + 1$ получилось бы:

$$\nu = B(2m+1) = 2B\left(m + \frac{1}{2}\right). \quad (7a)$$

Проведённое Черни (ср. т. I, гл. IX, § 2) подробное изучение полос HCl определённо говорит в пользу (7).

Мы добавим теперь к вращению *колебания*, принимая сначала, что они могут не возмущать друг друга. Волномеханический терм для гармонического осциллятора равен:

$$\frac{W}{h} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\nu_0. \quad (8)$$

где ν — «колебательное квантовое число», которое обозначено в (1.5.10) через n , ν_0 — собственная частота осциллятора, обозначенная там через ν .

Отсюда разность термов для перехода $\nu' \rightarrow \nu$ составляет:

$$\nu = (\nu' - \nu) \nu_0. \quad (9)$$

Полуцелая добавка к квантовым числам осциллятора сократилась в этом выражении, однако она станет существенной в следующем приближении [см. (29a)], и, в особенности, при исследовании смещения термов двух изотопов¹⁾. Для гармонического осциллятора действует правило отбора:

$$\nu' = \nu \pm 1. \quad (9a)$$

Так как нижний знак приводит к отрицательному ν (поглощение), то мы ограничимся верхним и заключим из (9)

$$\nu = \nu_0. \quad (10)$$

При сложении с вкладом (7) вращательного перехода получим:

$$\nu = \nu_0 + 2B(j + 1). \quad (11)$$

Из опыта известно²⁾, что ν_0 велико по сравнению с вкладом вращательного перехода и поэтому второй член может быть и отрицательным без того, чтобы сделать ν меньшим нуля. Мы можем поэтому использовать и нижний знак в (6), что даст для вклада вращательного перехода $\nu = -2Bj$ вместо (7).

Объединяя это с (10), получаем:

$$\nu = \nu_0 - 2Bj. \quad (12)$$

Выражения (11) и (12) совпадают с положительной и отрицательной ветвями колебательно-вращательного спектра [т. I, гл. IX, § 2, уравнение (5)]. Что касается их теоретического и экспериментального обсуждения, то мы можем отослать читателя к первому тому, в особенности к рис. 137 и 138. Обсуждавшийся там *пробел* в «двойной полосе» при $\nu = \nu_0$ объясняется с точки зрения волновой механики тем, что j в (12) может принимать лишь значения 1, 2, 3, ... (значение $j = 0$ бессмысленно, так как отвечало бы переходу $0 \rightarrow -1$). Старая квантовая теория, исходившая из (7a), была бессильна объяснить этот пробел.

Исследуем теперь взаимное влияние колебательных и вращательных термов. Сначала нам придётся несколько подробнее рассмотреть модель гантели и её обе массы m_1 и m_2 . Задача является сначала шестимерной, однако в ней, так же как и в шестимерной задаче Кеплера (§ 4), можно разделить трансляционное движение центра инерции (масса равна $M = m_1 + m_2$) и относительное движение (масса равна приведённой массе $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$) [см. (6) и (7) на стр. 129]. Последнее из этих уравнений после включения постоянной энергии трансляционного движения W_t в W и замены кулоновского взаимодействия произвольной функцией V расстояния между этими массами будет иметь вид:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V)\psi = 0. \quad (13)$$

¹⁾ См. R. S. Mulliken, Phys. Rev. 25, 259 (1925). Первыми примерами были VO и MgH.

²⁾ Расстояния между краями полос велики по сравнению с расстояниями между линиями в полосе.

где Δ надо образовать из относительных координат обеих частиц. Положим

$$V = f(\rho), \quad \rho = \frac{r}{a}, \quad (14)$$

где a — расстояние между обеими массами в состоянии равновесия. Следовательно, $a = a_1 + a_2$, где a_1 и a_2 означают расстояния обеих масс от центра инерции. Тогда из элементарных соображений для момента инерции относительно центра инерции мы получаем:

$$J = m_1 a_1^2 + m_2 a_2^2 = m a^2. \quad (15)$$

После умножения на a^3 (13) можно переписать в виде

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho \psi) = \frac{1}{\rho^3} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \rho \psi}{\partial \theta} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \rho \psi}{\partial \theta^2} \right\} + \frac{2J}{\hbar^2} (W - f(\rho)) \rho \psi = 0. \quad (16)$$

Положим

$$\rho \psi = F(\rho) P_J^m(\cos \theta) e^{i m \varphi} \quad (16a)$$

и получим тогда, учитывая дифференциальное уравнение для шаровых функций, уравнение для радиальной части $F(\rho)$:

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} - \frac{J(J+1)}{\rho^2} F + \frac{2J}{\hbar^2} (W - f(\rho)) F = 0. \quad (17)$$

Мы положим в соответствии с (5) дополнения 13 первого тома

$$f(\rho) = A - B \left(\frac{1}{\rho} - \frac{2}{2\rho^2} + b(\rho - 1)^3 + c(\rho - 1)^4 + \dots \right). \quad (18)$$

Такая форма автоматически удовлетворяет тому условию, чтобы $\rho = 1$ было точкой равновесия двух масс в силовом поле $V = f(\rho)$ и обладает благодаря наличию постоянных A, B, b, c, \dots достаточной общностью; она отвечает произвольному электростатическому взаимодействию, которое может иметь место между двумя заряженными ионами. Действительно, если мы образуем силу, действующую по направлению r :

$$K = -\frac{\partial f}{\partial r} = -\frac{1}{a} f'(\rho) = \frac{B}{a} \left[-\frac{1}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^3} + 3b(\rho - 1)^2 + \right. \\ \left. + 4c(\rho - 1)^3 + \dots \right] = -\frac{B}{a} \left[\frac{\rho - 1}{\rho^3} - 3b(\rho - 1)^2 - \dots \right],$$

то в ней будут представлены все степени расстояния $\rho - 1$. Если мы положим здесь $b = c = \dots = 0$, то получим систему, близкую к гармоническому осциллятору (но не совпадающую с ним), для которой сила $-K$, возвращающая систему в положение равновесия, пропорциональна $r - a$ (пока мы будем считать ρ^3 в знаменателе приближённо равным единице). Коэффициент при $r - a$ будет при этом равен $\frac{B}{a^2}$; делённый на приведённую массу m , он даст квадрат угловой частоты малых колебаний осциллятора. Обозначив эту частоту ω_0 , имеем:

$$\omega_0^2 = \frac{B}{J}, \quad \text{или} \quad B = J\omega_0^2. \quad (19)$$

Разложение (18) было впервые применено Кратцером, оно имело решающее значение для развития прежней теории полосатых спектров и в равной степени является полезным и для современного волномеханического рассмотрения

этой задачи¹⁾. Именно оно даст нам возможность, как мы сейчас покажем, рассмотреть «вращающийся осциллятор» с помощью простого метода полиномов. При этом мы отвлечёмся от поправочных членов с коэффициентами b, c, \dots ; если бы мы хотели их учесть, то нам пришлось бы прибегнуть к методам теории возмущений. Относительно другого возможного выбора выражения для потенциала, который позволяет ещё лучше удовлетворить опытным данным относительно полосатых спектров, см. дополнение 9.

В силу (18) и (19) наше дифференциальное уравнение (17) гласит:

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \left\{ \lambda + \gamma^2 \left(\frac{2}{\rho} - \frac{1}{\rho^2} \right) - \frac{j(j+1)}{\rho^2} \right\} F = 0, \quad (20)$$

где мы положили сокращённо

$$\lambda = \frac{2J}{\hbar^2} (W - A), \quad \gamma = \frac{J\omega_0}{\hbar}. \quad (21)$$

Мы должны различать два случая: $\lambda > 0$ и $\lambda < 0$, непрерывный и дискретный спектры. $\lambda = 0$ является точкой сгущения дискретного спектра (как колебательного, так и вращательного). К этой границе примыкает непрерывный спектр для $\lambda > 0$. Мы рассмотрим здесь только дискретный спектр и положим

$$-\lambda = \beta^2 = \frac{2J}{\hbar^2} (A - W). \quad (22)$$

Здесь β , равно как и γ и λ , являются действительными числами.

Асимптотическое поведение F для $\rho \rightarrow \infty$ получается тогда из уравнения

$$F'' = \beta^2 F$$

в виде:

$$F = e^{\pm \beta \rho}.$$

Поскольку надо потребовать, чтобы при $\rho \rightarrow \infty$ F оставалось конечным, мы выберем нижний знак в экспоненте и положим

$$F = e^{-\beta \rho} \varpi. \quad (23)$$

Тем самым из (20) получится уравнение для новой неизвестной функции ϖ :

$$\rho^2 \varpi'' - 2\beta \rho \cdot \rho \varpi' + [-\gamma^2 - j(j+1) + 2\gamma^2 \rho] \varpi = 0. \quad (24)$$

Это уравнение снова имеет вид (9) дополнения 2. Следовательно, его можно элементарно проинтегрировать с помощью полиномов. Сравнивая (24) с (9) дополнения 2, заключаем, что

$$\begin{aligned} A_2 &= 1, & B_2 &= 0, & A_1 &= 0, & B_1 &= -2\beta, \\ A_0 &= -\gamma^2 - j(j+1), & B_0 &= 2\gamma^2. \end{aligned}$$

Следовательно, если мы положим

$$\varpi = \rho^n Q_n(\rho), \quad (25)$$

где Q_n — полином степени n , то из (10) и (12) дополнения 2 получим:

$$\left. \begin{aligned} \alpha(\alpha-1) &= \gamma^2 + j(j+1), \\ \alpha &= \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(j + \frac{1}{2}\right)^2} \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

¹⁾ Впервые проведённого Фюсом: E. Fues, Ann. d. Phys. 80, 367 (1926); 81, 281 (1926).

(мы опустили, как это следует из условий в нуле, отрицательный знак у корня) и

$$\beta = \frac{\gamma^2}{\alpha + n}. \tag{27}$$

В силу (22) в β содержится собственное значение W , поэтому определяющее β уравнение (27) является одновременно и решением задачи о собственных значениях. Если мы подставим в (27) α из (26), то обнаружим, что собственное значение зависит от двух квантовых чисел j и n . Полиномиальная составляющая Q_n собственной функции, которую мы будем теперь записывать аккуратнее, как Q_n^j , изображена на рис. 13 для $j=0$ и несколько первых значений n .

Формулу (27) можно будет считать полностью раскрытой, если мы подставим туда α из (26) и положим n равным «колебательному квантовому числу» ν из (8):

$$\beta = \frac{\gamma^2}{\sqrt{\gamma^2 + \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 + \nu + \frac{1}{2}}}. \tag{28}$$

Отметим, что оба квантовых числа j и ν входят в форме $j + \frac{1}{2}$ и $\nu + \frac{1}{2}$. Для обсуждения (28) заметим, что $\gamma \gg 1$. Именно, согласно (21), $\frac{\gamma}{2}$ означает отношение собственного значения для колебаний для $\nu = 0$ (равного $\frac{\hbar \nu_0}{2} = \frac{\hbar \omega_2}{2}$) к собственному значению вращательной энергии для $j = 1$ (которое равно $2B\hbar = \frac{\hbar^2}{J}$). Известно, что это отношение является большим числом (ср. примечание на стр. 130, порядок величины составляет 20). Поэтому, пока мы рассматриваем не слишком большие значения j и ν , мы можем разложить (28) в ряд, оставляя сначала только низшие степени по $\frac{1}{\gamma}$:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\gamma}{\sqrt{1 + \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\gamma}\right)^2 + \frac{\nu + \frac{1}{2}}{\gamma}}} = \frac{\gamma}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\gamma}\right)^2 + \frac{\nu + \frac{1}{2}}{\gamma} + \dots} = \\ &= \gamma \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{j + \frac{1}{2}}{\gamma}\right)^2 - \frac{\nu + \frac{1}{2}}{\gamma} + \dots \right], \\ \beta^2 &= \gamma^2 \left[1 - \frac{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2} - 2 \frac{\nu + \frac{1}{2}}{\gamma} + \dots \right]. \end{aligned}$$

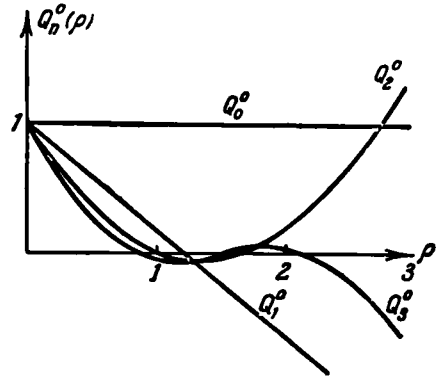


Рис. 13. Первые четыре полинома Q_n^0 :

$$\begin{aligned} Q_0^0 &= 1, \quad Q_1^0 = 1 - \frac{\beta}{\alpha} \rho, \\ Q_2^0 &= 1 - 2 \frac{2\beta\rho}{2\alpha} + \frac{(2\beta\rho)^2}{2\alpha(2\alpha+1)}, \\ Q_3^0 &= 1 - 3 \frac{2\beta\rho}{2\alpha} + \\ &+ 3 \frac{(2\beta\rho)^2}{2\alpha(2\alpha+1)} - \frac{(2\beta\rho)^3}{2\alpha(2\alpha+1)(2\alpha+2)}. \end{aligned}$$

Эти выражения легче всего получить из выражения (31) через гипергеометрическую функцию, которое будет выведено ниже. Для построения чертежей выбрано значение $\gamma = 10$, α и β были вычислены с помощью (26), (27). На самом деле в большинстве случаев γ ещё больше. Для $j > 0$, но не слишком большого, Q_n^j лишь незначительно отличаются от приведённых здесь Q_n^0 .

Поэтому, пока мы рассматриваем не слишком большие значения j и ν , мы можем разложить (28) в ряд, оставляя сначала только низшие степени по $\frac{1}{\gamma}$:

В силу (21) и (22) отсюда следует:

$$\left. \begin{aligned} A - W &= \frac{J\omega_0^2}{2} \left[1 - \frac{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2}{J^2 \omega_0^2} - 2 \frac{\left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar}{J\omega_0} + \dots \right], \\ W &= \text{const} + \frac{j(j+1)\hbar^2}{2J} + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 + \dots, \\ \text{const} &= A - \frac{J\omega_0^2}{2} + \frac{\hbar^2}{8J}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Итак, мы находим, отвлекаясь от первого постоянного члена, что в первом приближении наше теперешнее W получается сложением собственных значений для чистого ротатора (2) и для чистого осциллятора (8). Первый постоянный член связан с энергией диссоциации двухатомной молекулы.

Однако уравнение (28) содержит нечто большее, чем первое приближение, оно даёт, кроме того, и общий закон, по которому возмущают друг друга колебания и вращения при произвольных квантовых числах. Например, для членов второго порядка получаем:

$$\frac{3\hbar^2 \left(v + \frac{1}{2}\right)^2}{2J} - \frac{3\hbar^3 \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \left(v + \frac{1}{2}\right)}{2\omega_0 J^2} - \frac{\hbar^4 \left(j + \frac{1}{2}\right)^4}{2\omega_0^2 J^3}. \quad (29a)$$

Два первых члена здесь в точности совпадают с обеими поправками Кратцера ¹⁾ из (16) дополнения 13 т. I, если мы положим там $b = c = 0$, как это мы уже сделали выше, — с тем единственным исключением, что фигурирующие в т. I целые квантовые числа m и n надо заменить на полуцелые $j + \frac{1}{2}$ и $v + \frac{1}{2}$. Последний поправочный член был опущен в т. I как менее важный, но содержится в оригинальной работе ²⁾. Этот пример ещё раз иллюстрирует тесный параллелизм между волномеханическими расчётами и старой квантовой теорией.

Естественно, что для больших значений j и v нельзя разлагать (28) в ряд, а надо использовать его в первоначальном виде. Тогда из (28) получается как для $v \rightarrow \infty$, так и для $j \rightarrow \infty$, что $\beta \rightarrow 0$, если только мы вообще можем столь далеко экстраполировать наши представления о почти-гармонической связи. Предельное значение $\beta = 0$ (что означает согласно (22) и $\lambda = 0$, $W = A$) является поэтому точкой сгущения как для границ полос ($v \rightarrow \infty$), так и для линий каждой полосы ($j \rightarrow \infty$), что мы уже утверждали выше в замечании, следующем за (21).

Для того чтобы исследовать, наконец, природу введённых полиномов Q , мы подставим (25) в дифференциальное уравнение (24) и получим, учитывая (26) и (27):

$$\rho Q'' + 2(\alpha - \beta\rho) Q' + 2\beta n Q = 0.$$

Если ввести вместо ρ независимую переменную $x = 2\beta\rho$ и обозначать дифференцирование по x точками, то получится:

$$x\ddot{Q} + (2\alpha - x)\dot{Q} + nQ = 0. \quad (30)$$

¹⁾ Сравнение обоих членов приводит к тому, что использованная в т. I, вспомогательная величина u совпадает с $\frac{\hbar}{J\omega_0}$, как это и должно быть по её определению.

²⁾ Kratzer, Zs. f. Phys. 3, 289 (1920).

Это дифференциальное уравнение совпадает с точностью до обозначений с дифференциальным уравнением вырожденной гипергеометрической функции (2.22). Итак, мы получаем, если отвлечься от несущественного постоянного множителя:

$$Q = F(-n, 2\alpha, x) = F(-n, 2\alpha, 2\beta\rho). \quad (31)$$

Полиномиальную природу Q можно увидеть и из этого представления: так как первый аргумент F является отрицательным целым числом $-n = -\nu$, то ряд для F обрывается на n -м члене.

Относительно дальнейшей теории полосатых спектров см. т. I, гл. IX, § 3. К рассмотренным здесь вращательному и колебательному термам надо добавить ещё и электронный терм, который примерно во столько же раз больше колебательного, во сколько колебательный больше вращательного. Электронные термы имеют много общего с бальмеровскими термами атомных спектров, однако не поддаются столь единообразному рассмотрению, как колебательные и вращательные.

Вопросы интенсивностей мы можем затронуть здесь лишь весьма кратко. В принципе вероятности вращательных и колебательных переходов уже рассмотрены в гл. I, § 9. Особенно интересные вопросы, возникающие для молекул с одинаковыми атомами, как N_2 , O_2 и т. д., будут обнаружены в гл. IX.

§ 12. МОЛЕКУЛА КАК СИММЕТРИЧНЫЙ ВОЛЧОК

В гл. IX т. I мы различали двухатомные молекулы, момент которых относительно линии, соединяющей ядра, равен нулю и которые не могут иметь поэтому составляющей момента количества движения по этой оси, и молекулы-волчки, моменты инерции которых представляются эллипсоидом вращения и которые могут поэтому вращаться и вокруг оси симметрии. Последние, пока конфигурации атомов можно рассматривать как жёсткие, соответствуют «симметричным волчкам» обыкновенной механики. Несравненно более сложную задачу об асимметричном волчке (эллипсоид инерции общего вида) мы рассматривать здесь не будем.

Вопрос о квантовании симметричных молекул-волчков приобрёл практический интерес с тех пор, как в формальдегиде CH_2O был найден ¹⁾ пример полосатого спектра, который отчётливо указывает на существование двух различных, не обращающихся в нуль, моментов инерции. Квантовая формула для таких молекул была приведена уже в т. I, гл. IX, § 6, формула (7), и притом в том окончательном виде, к которому приводит волново-механическое рассмотрение ²⁾. Мы хотим теперь построить доказательство этой формулы.

Система материальных точек, состоящая из закреплённого в точке O твёрдого тела, обладает тремя степенями свободы; в качестве соответствующих координат можно выбрать *эйлеровы углы*, которые обозначают обычно через ϑ , ψ , φ , но которые мы будем обозначать (поскольку ψ уже использовано) через ϑ , φ , χ . Эти углы определяют, как известно, положение твёрдо связанной с волчком системы отсчёта, а именно, «оси волчка» (оси Z — оси симметрии эллипсоида инерции) и экваториальной плоскости (плоскости X, Y) относительно неподвижной системы координат x, y, z ; при

¹⁾ V. Henri und S. A. Schou, Zs. f. Phys. 49, 774 (1928).

²⁾ F. Reiche, Zs. f. Phys. 39, 444 (1926); R. de L. Kronig und Rabi, Phys. Rev. 29, 262 (1927); C. Manneback, Phys. Zs. 28, 72 (1927); D. M. Dennison, Phys. Rev. 28, 318 (1926) (по матричной механике). Относительно вопросов интенсивностей см. Rademacher und Reiche, Zs. f. Phys. 41, 453 (1927).

этом линия пересечения плоскости X, Y с плоскостью x, y называется «линией узлов». Далее, ϑ означает угол между осями z и Z , χ — угол между линией узлов и осью X , φ — угол между линией узлов и осью x ; ϑ меняется от 0 до π , а χ и φ — от 0 до 2π .

Кинетическая энергия симметричного волчка, записанная через эти углы и соответствующие угловые скорости, имеет вид:

$$T(q, \dot{q}) = \frac{J}{2} (\dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\varphi}^2) + \frac{K}{2} (\dot{\chi} + \cos \varphi \dot{\varphi})^2, \quad (1)$$

где J — момент инерции относительно оси, лежащей в экваториальной плоскости, а K — относительно оси волчка.

Эту формулу можно получить следующим образом: будем исходить из общего выражения кинетической энергии через главные моменты инерции:

$$T = \frac{1}{2} (A\omega_X^2 + B\omega_Y^2 + C\omega_Z^2),$$

где ω_X, ω_Y и ω_Z относятся к скреплённым с волчком главным осям X, Y, Z (мы отказываемся здесь от обычного обозначения p, q, r , так как будем использовать q и p для координат и импульсов). Поэтому для симметричного волчка ($A = B = J, C = K$) получаем:

$$T = \frac{J}{2} \omega_A^2 + \frac{K}{2} \omega_Z^2, \quad (2)$$

где $\omega_A = \sqrt{\omega_X^2 + \omega_Y^2}$ означает прямоугольную проекцию вектора угловой скорости ω на экваториальную плоскость, а ω_Z — проекцию на ось волчка. Наряду с ними рассмотрим и косоугольные компоненты вектора угловой скорости, именно $\dot{\vartheta}, \dot{\varphi}$ и $\dot{\chi}$, по линии узлов, оси z и оси волчка. Таким образом, мы разложили вектор угловой скорости двумя способами: с одной стороны, на прямоугольные составляющие ω_Z и ω_A , а с другой стороны — на косоугольные составляющие $\dot{\vartheta}, \dot{\varphi}, \dot{\chi}$; ср. рис. 14а и 14б. Проектируя последние на ось волчка, мы должны получить ω_Z ; таким образом,

$$\omega_Z = \dot{\chi} + \cos \vartheta \dot{\varphi} \quad (3а)$$

[$\dot{\vartheta}$ не даёт никакого вклада в (3а), поскольку линия узлов ортогональна оси волчка]. Спроектируем теперь косоугольные составляющие на экваториальную плоскость. Теперь обратится в нуль проекция $\dot{\chi}$, так как экваториальная плоскость перпендикулярна к оси тела (рис. 14б). Проекция $\dot{\vartheta}$ лежит в экваториальной плоскости (именно на линии узлов); проекция $\dot{\varphi}$ лежит на нормали к линии узлов (именно на линии пересечения плоскости рис. 14б с плоскостью рис. 14а). Поэтому

$$\omega_A^2 = \dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\varphi}^2. \quad (3б)$$

Если подставить (3а, 3б) в (2), то (1) будет доказано. Отметим ещё, что ось X образует с линией узлов угол χ , а следовательно, ось Y — угол $\chi - \frac{\pi}{2}$, так что помимо (3б) можно выписать ещё и уравнения:

$$\left. \begin{aligned} \omega_X &= \cos \chi \dot{\vartheta} + \sin \chi \sin \vartheta \dot{\varphi}, \\ \omega_Y &= \sin \chi \dot{\vartheta} - \cos \chi \sin \vartheta \dot{\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (3в)$$

из которых (3б) получается как следствие.

В силу общих соотношений между импульсами p и кинетической энергией $T(q, \dot{q})$ мы получаем из (1):

$$p_\theta = J\dot{\theta}, \quad p_\varphi = (J \sin^2 \theta + K \cos^2 \theta) \dot{\varphi} + K \cos \theta \dot{\chi},$$

$$p_\chi = K(\dot{\chi} + \cos \theta \dot{\varphi}).$$

Разрешая эти уравнения относительно скоростей и подставляя в $T(q, \dot{q})$, находим:

$$T(q, p) = \frac{p_\theta^2}{2J} + \frac{(p_\varphi - \cos \theta p_\chi)^2}{2J \sin^2 \theta} + \frac{p_\chi^2}{2K}. \quad (4)$$

Обозначим коэффициенты, с которыми входят в это выражение произве-

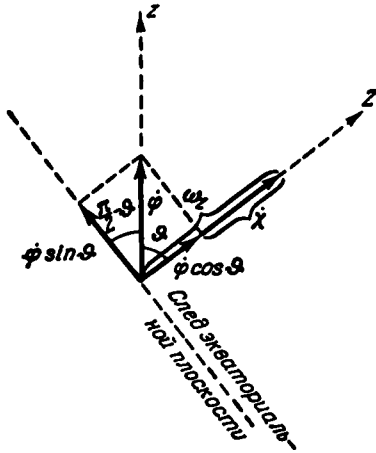


Рис. 14а. Плоскость, проведённая через ось волчка (ось Z) и ось z . Проекции угловой скорости на ось волчка и на след экваториальной плоскости.

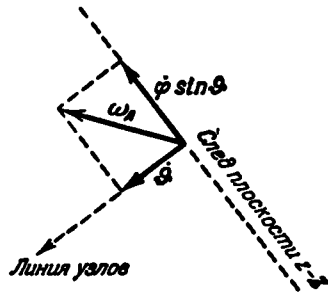


Рис. 14б. Проекция угловой скорости на экваториальную плоскость.

дения $p_\theta^2, 2p_\theta p_\varphi, \dots$, через $g_{\theta\theta}, g_{\theta\varphi}, \dots$, так что из (4) получается:

$$\left. \begin{aligned} g_{\theta\theta} &= \frac{1}{2J}, & g_{\varphi\varphi} &= \frac{1}{2J \sin^2 \theta}, & g_{\chi\chi} &= \frac{\cos^2 \theta}{2J \sin^2 \theta} + \frac{1}{2K}, \\ g_{\theta\varphi} &= g_{\theta\chi} = 0, & g_{\varphi\chi} &= -\frac{\cos \theta}{2J \sin^2 \theta}. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Для детерминанта Δ квадратичной формы $T(q, p)$ отсюда имеем:

$$\Delta = |g^{ij}| = \begin{vmatrix} \frac{1}{2J} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2J \sin^2 \theta} & -\frac{\cos \theta}{2J \sin^2 \theta} \\ 0 & -\frac{\cos \theta}{2J \sin^2 \theta} & \frac{\cos^2 \theta}{2J \sin^2 \theta} + \frac{1}{2K} \end{vmatrix} = \frac{1}{8J^2 K \sin^2 \theta}. \quad (6)$$

Обратимся теперь к дополнению 10; из имеющегося там уравнения (20) находим функциональный детерминант D , именно:

$$D = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} = 2J \sin \theta \sqrt{2K}. \quad (7)$$

Подставим выражения (4) и (7) в уравнение Шредингера в форме, приведённой в (16) дополнения 10. В конце дополнения 10 доказывается, что в нашем случае твёрдой молекулы выполняются все предположения, при которых справедлива такая форма уравнения. Получаем:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{J}{K} \sin \theta \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \chi^2} - \frac{2 \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi \partial \chi} + \frac{2J}{\hbar^2} \sin \theta W \psi = 0. \quad (8)$$

Поскольку мы интересуемся только свободным движением молекулы, то положим $V = 0$.

Из (8) следует прежде всего, что χ и φ являются, как и в обыкновенной механике симметричного волчка, циклическими координатами. В классическом случае это приводит, как известно, к тому, что отвечающие им импульсы p_χ и p_φ оказываются постоянными; в волновой механике то же самое обстоятельство позволяет записать зависимость волновой функции от χ и φ в специальном виде:

$$\psi = \Theta(\theta) e^{i\tau\chi + i\tau'\varphi}. \quad (9)$$

Здесь τ и τ' должны быть целыми (положительными или отрицательными) числами, так как ψ должна быть во всей области изменения координат однозначной функцией и поэтому периодической функцией θ и χ с периодом 2π . После такой подстановки (8) переходит в обыкновенное дифференциальное уравнение для неизвестной функции Θ :

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \left[\tau^2 + \left(\cos^2 \theta + \frac{J}{K} \sin^2 \theta \right) \tau^2 - 2 \cos \theta \tau \tau' - \frac{2JW}{\hbar^2} \sin^2 \theta \right] \Theta = 0. \quad (10)$$

Мы введём, как и в случае шаровых функций, новую независимую переменную $x = \cos \theta$ и положим сокращённо:

$$\lambda = \frac{2JW}{\hbar^2} + \tau^2 - \frac{J}{K} \tau^2. \quad (10a)$$

Тогда после простого преобразования из (10) получится:

$$(1 - x^2)^2 \frac{d^2 \Theta}{dx^2} - 2x(1 - x^2) \frac{d\Theta}{dx} + [\lambda(1 - x^2) - \tau^2 - \tau'^2 + 2\tau\tau'x] \Theta = 0. \quad (11)$$

Единственными особыми точками этого уравнения в области $-1 \leq x \leq +1$ являются граничные точки $x = \pm 1$. Чтобы выяснить характер сингулярности в этих точках, напомним:

$$1 \mp x = y, \quad (11a)$$

следовательно,

$$x = \pm (1 - y), \quad 1 \pm x = 2 - y, \quad (11b)$$

и получим вместо (11), если обозначить дифференцирование по y штрихами:

$$y^3(2 - y)^2 \Theta'' + 2y(1 - y)(2 - y) \Theta' - \{\lambda y(2 - y) - (\tau \mp \tau')^2 \mp 2\tau\tau' y\} \Theta = 0. \quad (12)$$

Как и в предыдущих случаях, ищем решение в виде:

$$\Theta = y^i \sum a_n y^n \quad (13)$$

и получаем для γ [приравнявая нулю коэффициент при y в ряду в левой части (12)] характеристическое уравнение:

$$4\gamma(\gamma - 1) + 4\gamma - (\tau \mp \tau')^2 = 0,$$

т. е.

$$4\gamma^2 = (\tau \mp \tau')^2; \quad \gamma = \frac{|\tau \mp \tau'|}{2}. \quad (14)$$

Введя знак абсолютной величины, мы выбрали тот из корней, который приводит к удовлетворению требования непрерывности собственной функции.

Выделим теперь в Θ обе характеристические степени в обеих особых точках; переменную y будем при этом отсчитывать, например, от точки $x = -1$, так что из (11а, 11б) получится $1 + x = y$, $1 - x = 2 - y$. Тогда (13) примет вид:

$$\Theta = f \cdot \vartheta, \quad f = (2 - y)^{\frac{|\tau - \tau'|}{2}} y^{\frac{|\tau + \tau'|}{2}}. \quad (15)$$

Найдём дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет ϑ . Для этого подставим (15) в (12), где надлежит теперь брать нижний знак, и сократим всё на множитель $y(2 - y)f$. Получится:

$$y(2 - y)\vartheta'' + [|\tau + \tau'| (2 - y) - |\tau - \tau'| y + + 2(1 - y)]\vartheta' + (\lambda + \Delta)\vartheta = 0. \quad (16)$$

После некоторых преобразований находим значение введённой здесь константы Δ :

$$\Delta = -\frac{1}{2}(\tau^2 + \tau'^2) - \frac{1}{2}|\tau^2 - \tau'^2| - \frac{1}{2}|\tau - \tau'| - \frac{1}{2}|\tau + \tau'|. \quad (16a)$$

Если ввести теперь дальнейшее сокращённое обозначение

$$\tau^* = \frac{1}{2}(|\tau + \tau'| + |\tau - \tau'|), \quad (16b)$$

то можно будет переписать (16а) в виде

$$\Delta = -\tau^{*2} - \tau^* = -\tau^*(\tau^* + 1), \quad (16в)$$

а само уравнение (16) перейдёт в

$$y(2 - y)\vartheta'' + 2[1 + |\tau + \tau'| - y(\tau^* + 1)]\vartheta' + [\lambda - \tau^*(\tau^* + 1)]\vartheta = 0. \quad (17)$$

Если мы сравним (17) с общей формой (9) дополнения 2 для дифференциальных уравнений встречающегося нам типа, то установим сейчас же с помощью уравнения (10) дополнения 2, что решением характеристического уравнения будет $\alpha = 0$, как оно и должно быть, поскольку степенной множитель у точки $y = 0$ уже выделен [ср. (15)]. Поэтому уравнение (12) дополнения 2 даёт:

$$\lambda = n(n - 1) + 2n(\tau^* + 1) + \tau^*(\tau^* + 1), \quad (18)$$

где n — степень полинома, который мы получили из требования обрыва ряда. Но (18) равносильно

$$\lambda = j(j + 1), \quad (19)$$

если только мы положим

$$j = n + \tau^*. \quad (20)$$

Таким образом, введённое j является *целым положительным числом*, так как n является степенью полинома, а τ^0 , в силу (16б), равно просто наибольшему из положительных целых чисел $|\tau|$ и $|\tau'|$.

Наконец, в силу (10а) из (19) следует:

$$W = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2J} + \frac{\tau^2\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{K} - \frac{1}{J} \right). \quad (21)$$

Но это и есть как раз уравнение (7) в гл. IX, § 6, т. I, которое мы хотели доказать, с тем несущественным изменением, что мы пишем теперь τ вместо j_0 . И действительно, наше теперешнее τ , которое относится к углу φ поворота вокруг оси волчка, соответствует прежнему j_0 и измеряет, как и j_0 , «собственный момент» волчка. В нашей формуле содержится и особо отмеченное в § 6 гл. IX т. I выпадение части линий полосы вблизи нуля. Действительно, в то время как степень n нашего полинома может принимать все значения $0, 1, 2, \dots$, число j ограничено, в силу (20), неравенством $j \geq \tau^0$. Наконец, волномеханически можно обосновать и появление нулевой ветви, так как правила отбора для j , получающиеся из нашего выражения (8), которое отвечает движению, составленному из прецессии и вращения, будут отличаться от правил отбора, полученных для случая чистого вращения. Именно, переход $j \rightarrow j$ не будет запрещён, как это было при чистом вращении.

Что же касается аналитического характера фигурирующих здесь полиномов, то упомянем только, что и они оказываются специальными случаями гипергеометрического ряда, именно так называемыми полиномами Якоби. Хунд¹⁾ указывает на интересную связь между собственными функциями нашей задачи и шаровыми функциями в четырёх измерениях, 'благодаря которой проясняется и природа полиномов Якоби.

¹⁾ F. Hund, Zs. f. Phys. 51, 11 (1928) и Göttinger Nachr., 1927, стр. 465.

ГЛАВА III ОБЩИЕ ИДЕИ И МЕТОДЫ

§ 1. ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ

Обсуждая в § 7 гл. I физический смысл волновой функции, мы познакомились с её вероятностным истолкованием. Рассмотрим здесь простейший случай свободного одномерного движения материальной точки с массой m ; «положение» её будем определять статистически, вычисляя вероятность пребывания в интервале dx около точки x , т. е. $|u(x, t)|^2 dx$. Будем считать что начальное распределение вероятностей известно из опыта и даётся гауссовой кривой

$$|u(x, 0)|^2 = C^2 e^{-\frac{x^2}{b^2}}. \quad (1)$$

Вещественная константа C определяется из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u(x, 0)|^2 dx = 1; \quad C^2 = \frac{1}{b\sqrt{\pi}}. \quad (2)$$

Обратная длина $1/b$ представляет собой меру точности произведённого в начальный момент измерения.

Соотношение (1) определяет волновую функцию $u(x, 0)$ лишь с точностью до произвольной фазы. Таким образом, в согласии с (1) мы имеем право положить

$$u(x, 0) = C e^{-\frac{x^2}{2b^2} + ikx}. \quad (3)$$

Смысл волнового числа k нам ещё предстоит в дальнейшем выяснить.

Изменение волновой функции со временем (и, следовательно, дальнейшее поведение материальной точки) определяется уравнением (I.6.9) (в котором потенциальную энергию надо положить равной нулю):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{2m}{i\hbar} \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (4)$$

Это есть не что иное, как диффузионное уравнение с мнимым коэффициентом диффузии

$$a = \frac{i\hbar}{2m}. \quad (4a)$$

Соответственно решение (4), принимающее при $t=0$ заданное значение $u(x, 0)$, можно сразу написать в хорошо известном виде:

$$u(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{a\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4at}} u(\xi, 0) d\xi, \quad (5)$$

или, подставляя $u(x, 0)$ из (3):

$$u(x, t) = \frac{C}{2\sqrt{a\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4at} - \frac{\xi^2}{2b^2} + ik\xi} d\xi. \quad (6)$$

Полагая

$$\frac{(x-\xi)^2}{4at} + \frac{\xi^2}{2b^2} - ik\xi = (\alpha\xi - \beta)^2 - A$$

и сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях ξ , находим:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\frac{1}{4at} + \frac{1}{2b^2}}, & \beta &= \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{x}{2at} + ik \right), \\ A &= \frac{1}{4\alpha^2} \left(\frac{ikx - x^2/2b^2}{at} - k^2 \right). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Таким образом,

$$u(x, t) = \frac{Ce^A}{2\sqrt{a\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\alpha\xi - \beta)^2} d\xi = \frac{Ce^A}{2\alpha\sqrt{at}}. \quad (8)$$

Составляя квадрат модуля

$$|u(x, t)|^2 = \frac{C^2 e^{4A}}{4|\alpha|^2 |a| t} \quad (9)$$

и пользуясь (2), (4а) и (7), получаем после элементарных вычислений:

$$|u(x, t)|^2 = \frac{1}{b\sqrt{\pi}\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2}} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k t}{m}\right)^2}{b^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2\right]^2} \right\}. \quad (10)$$

При данном t максимум этой функции лежит в точке $x = \frac{\hbar k t}{m}$; с течением времени он перемещается с постоянной скоростью

$$v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (11)$$

Соответствующий импульс $p = \hbar k$; таким образом, волновое число k определяет длину волны де Бройля $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, связанной с максимумом («центром тяжести») волнового пакета. Тем самым выясняется и смысл фазы функции $u(x, 0)$ [см. (3)].

В то время как «центр тяжести» волнового пакета движется с неизменной скоростью, ширина пакета непрерывно возрастает со временем. В самом деле, как видно из (10), амплитуда функции $|u(x, t)|^2$ (первый множитель) уменьшается, а полуширина гауссовской кривой увеличивается с увеличением t . Начальная ширина волнового пакета $2b$ увеличивается вдвое, когда знаменатель экспоненты становится равным $4b^2$, т. е. когда

$$1 + \left(\frac{\hbar t}{mb^2}\right)^2 = 4, \quad \text{или} \quad t = \sqrt{3} \frac{mb^2}{\hbar}. \quad (12)$$

При начальной ширине 2 м.м. ($b = 0,1 \text{ см.}$) волновой пакет, соответствующий материальной точке с массой 1 г. , расширяется вдвое примерно за $6 \cdot 10^{27}$ лет. Полагая, однако, $m = 0,9 \cdot 10^{-27} \text{ г.}$ (масса электрона), получим при том же (значительно превосходящем размеры атомов!) значении $b = 0,1 \text{ см.}$

$t = 0,02$ сек. Однако и такое расширение волнового пакета практически неощутимо, так как в реальных экспериментах скорость самых медленных электронов составляет около одной сотой скорости света, и они пролетают метровую трубку за $3 \cdot 10^{-5}$ сек. Таким образом, для волновых пакетов, начальная ширина которых имеет макроскопические размеры, квантовомеханический эффект «расползания» не играет никакой роли. Как будет показано в § 6, этот эффект тесно связан с соотношением неопределённости. С другой стороны, полагая попрежнему $m = 0,9 \cdot 10^{-27}$ г, но $b = 10^{-8}$ см (т. е. переходя в область атомных размеров), мы получаем в соответствии с (12) $t \approx 10^{-16}$ сек., т. е. волновой пакет полностью расплывается за очень короткое время.

Отсюда следует, что квадрат модуля волновой функции никак нельзя отождествить с плотностью заряда частиц в элементарном смысле (см. гл. I, стр. 51). В противном случае пришлось бы считать, что электрон после измерения его координат моментально «размазывается» по сколь угодно большому объёму, что противоречит простейшим опытным фактам: мы всегда имеем дело с практически точечными электронами. Едва ли остается ещё какая-нибудь возможность, кроме статистического толкования волновой функции, уже рассмотренного нами в § 7 гл. I. Если точность измерения координат электрона в начальный момент времени была очень велика, то через весьма короткое время будет практически равновероятно обнаружить электрон в любом другом месте. Вместе с тем в обычных катодных лучах вероятность обнаружить электрон в соответствии с опытом отлична от нуля только на определённых геометрических «лучах».

§ 2. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ ИСТОЛКОВАНИЕ КЛАССИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Образует теперь волномеханическое среднее значение координаты q [или, как мы иногда будем говорить, значение координаты центра тяжести волнового пакета, описываемого функцией $u(x, t)$]. Коль скоро плотность вероятности равна $|u|^2 = u^*u$, мы получаем:

$$\bar{q} = \int u^* q u d\tau. \quad (1)$$

Для краткости будем рассматривать случай одной материальной точки и соответственно понимать под $d\tau$ трёхмерный элемент объёма; заметим только, что всё дальнейшее без труда можно распространить на произвольную систему материальных точек или электронов. Будем считать, что u достаточно быстро исчезает в бесконечности, так что не только сходятся интегралы типа (1), но и обращаются в нуль все получающиеся из них при интегрировании поверхностные интегралы [см., например, уравнение (36)].

Если, в частности, выбрать в качестве u и u^* n -ю собственную функцию какой-либо определённой задачи, то \bar{q} представляет собой одновременно n -й диагональный элемент q_{nn} матрицы координат (см. § 4). Произвольный матричный элемент получается, если заменить u^* на u_n^* , а u — на u_m :

$$q_{nm} = \int u_n^* q u_m d\tau. \quad (1a)$$

А. Энергия и импульс. Уже в § 6 гл. I мы для вывода волнового уравнения заменяли механический импульс p оператором

$$p = \frac{\hbar}{i} \text{grad}. \quad (2)$$

Отсюда по образцу (1) получаем волномеханическое среднее значение импульса в виде интеграла по всему пространству

$$\bar{p} = \int u^* p u \, d\tau = \frac{\hbar}{i} \int u^* \text{grad } u \, d\tau. \quad (3)$$

Это выражение даёт волномеханическое истолкование классического понятия «импульс». Для задачи с собственными функциями имеем:

$$p_{nm} = \frac{\hbar}{i} \int u_n^* \text{grad } u_m \, d\tau. \quad (3a)$$

Очевидно, в выражениях типа (3), (3a) существенен порядок следования оператора grad и функций u , u^* . Операторы, вообще говоря, нельзя переставлять с места на место. С другой стороны, в уравнении (1), куда входят лишь обычные величины, можно произвольно изменять порядок множителей; в частности, с равным правом можно написать:

$$\bar{q} = \int q |u|^2 \, d\tau = \int q p \, d\tau.$$

Для дальнейшего будет удобно «симметризовать» выражение (3). Для этого вычтем из него очевидное соотношение

$$0 = \frac{\hbar}{2i} \int \text{grad}(u^* u) \, d\tau = \frac{\hbar}{2i} \int (u^* \text{grad } u + u \text{ grad } u^*) \, d\tau. \quad (3b)$$

Мы получим:

$$\bar{p} = \frac{\hbar}{2i} \int (u^* \text{grad } u - u \text{ grad } u^*) \, d\tau. \quad (3в)$$

В классической механике p и q связаны соотношением

$$p = m\dot{q}. \quad (4)$$

В волновой механике эта связь переносится на средние значения

$$\bar{p} = m\dot{\bar{q}}. \quad (4a)$$

Чтобы доказать это, вычислим $\dot{\bar{q}}$, пользуясь (1):

$$\dot{\bar{q}} = \int q (\dot{u} u^* + u \dot{u}^*) \, d\tau. \quad (5)$$

Для производных по времени надо подставить в соответствии с (1.6.9):

$$\left. \begin{aligned} \dot{u} &= -\frac{\hbar}{2im} \left(\Delta u - \frac{2m}{\hbar^2} V u \right), \\ \dot{u}^* &= +\frac{\hbar}{2im} \left(\Delta u^* - \frac{2m}{\hbar^2} V u^* \right). \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Тогда члены, содержащие V , исчезают в (5), и мы находим:

$$m\dot{\bar{q}} = -\frac{\hbar}{2i} \int q (u^* \Delta u - u \Delta u^*) \, d\tau. \quad (7)$$

Теорема Грина в дифференциальной форме гласит:

$$u^* \Delta u - u \Delta u^* = \text{div}(u^* \text{grad } u - u \text{ grad } u^*).$$

Интегрируя в (7) по частям, можно избавиться от дивергенции. Пусть, например, $q = x$. Тогда из трёх частных производных, к которым сводится дивергенция в прямоугольных координатах, отличный от нуля результат даёт лишь производная по x . С точностью до интеграла, который берётся по бесконечно удалённой поверхности и потому (см. выше) обращается в нуль, уравнение (7) даёт при этом:

$$m\dot{x} = \frac{\hbar}{2i} \int \left(u^* \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial u^*}{\partial x} \right) d\tau.$$

Таким же образом получаем и в общем случае

$$m\dot{q} = \frac{\hbar}{2i} \int \left(u^* \text{grad } u - u \text{grad } u^* \right) d\tau. \quad (8)$$

Правая часть этого уравнения есть по определению [см. (3)] не что иное, как среднее значение импульса \bar{p} ; тем самым равенство (4а) доказано.

Образуем теперь волновомеханическое среднее значение кинетической энергии K , классическое выражение для которой имеет вид:

$$K = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \quad (9)$$

На основании (2) мы получаем:

$$\bar{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int u^* \Delta u d\tau. \quad (10)$$

С другой стороны, среднее значение потенциальной энергии (если последняя может быть представлена как функция только от координат) есть

$$\bar{V} = \int u^* V u d\tau. \quad (11)$$

Соответственно получаем и для среднего от оператора Гамильтона $H = K + V$:

$$\bar{H} = \bar{K} + \bar{V}. \quad (12)$$

Подставляя сюда (10) и (11), находим:

$$\bar{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int u^* \left(\Delta u - \frac{2m}{\hbar^2} V u \right) d\tau. \quad (13)$$

Если, в частности, u есть стационарная волновая функция, принадлежащая данному гамильтониану $u = u_n = \psi_n e^{-i\omega_n t}$, то в силу уравнения Шредингера скобка в (13) равна

$$-\frac{2m}{\hbar^2} W_n u,$$

и (поскольку волновая функция нормирована на единицу)

$$\bar{H} = H_{nn} = W_n. \quad (13a)$$

С другой стороны, заменяя в (13) u^* , u на u_n^* , u_m , получаем благодаря условию ортогональности:

$$\bar{H}_{nm} = 0, \quad \text{т. е.} \quad \bar{K}_{nm} + \bar{V}_{nm} = 0. \quad (13b)$$

Таким образом, в системе своих собственных функций оператор Гамильтона является диагональным. Это обстоятельство можно рассматривать непосредственно как определение собственных функций, принадлежащих H .

Б. Общее замечание относительно операторов и их волномеханических средних значений. Определением (2) оператора импульса можно воспользоваться для того, чтобы дать общее правило составления волномеханического аналога любой классической величины. Мы представляем некоторую величину L как функцию координат и импульсов

$$L = L(q, p)$$

и сопоставляем ей оператор

$$L = L\left(q, \frac{\hbar}{i} \text{grad}\right).$$

Волномеханическое среднее значение величины L определяется как

$$\bar{L} = \int u^* L\left(q, \frac{\hbar}{i} \text{grad}\right) u \, d\tau. \quad (14)$$

Частным случаем этого общего соотношения является сказанное выше о кинетической и потенциальной энергии. То же будет иметь место и при вычислении различных средних значений в дальнейшем.

В. Закон движения центра тяжести и закон площадей. Теорема вириала. Основное уравнение классической механики материальной точки для случая консервативных сил имеет вид

$$\dot{p} = - \text{grad } V. \quad (I)$$

Принимая какую-нибудь (произвольную) точку за начало координат и векторно умножая (I) на радиус-вектор r , получаем закон площадей в его наиболее общей форме:

$$\frac{d}{dt} [rp] = - [r, \text{grad } V]. \quad (II)$$

Аналогично путём скалярного умножения на r получаем теорему вириала:

$$\frac{d}{dt} (rp) = 2K - (r, \text{grad } V). \quad (III)$$

Здесь, как и раньше, K обозначает кинетическую энергию; $(r, \text{grad } V)$ представляет собой «вириал» данной системы сил. Как известно, теорема вириала особенно полезна при изучении периодических или почти-периодических движений, когда она сводится к утверждению, что усреднённое по времени удвоенное значение кинетической энергии равно взятому с противоположным знаком вириалу системы. Частным случаем её является теорема, изложенная в дополнении 3 в первом томе.

Следует ещё заметить, что в классической механике ограничиваться только консервативными силами отнюдь не обязательно; в волновой механике, однако, это пока что необходимо, поскольку мы основываемся на простейшем волновом уравнении (6).

Волномеханические аналоги соотношений (I), (II), (III) получатся, если стоящие слева выражения рассматривать как операторы и по правилу (14) образовать их средние значения. Мы докажем, что последние равны волномеханическим средним значениям операторов, стоящих в правых частях соответствующих равенств.

На основании (3) левая часть (I) имеет вид:

$$\frac{d}{dt} \bar{p} = \frac{\hbar}{i} \int (u^* \text{grad } u + u \text{ grad } u^*) \, d\tau. \quad (Ia)$$

Аналогично получаем для левых частей (II) и (III):

$$\frac{d}{dt} [\overline{r p}] = \frac{\hbar}{i} \int [r, u^* \text{grad } \dot{u} + \dot{u}^* \text{grad } u] d\tau, \quad (\text{IIa})$$

$$\frac{d}{dt} (r p) = \frac{\hbar}{i} \int (r, u^* \text{grad } \dot{u} + \dot{u}^* \text{grad } u) d\tau. \quad (\text{IIIa})$$

Очевидно, дифференцирование по времени здесь относилось только к волновым функциям u , u^* ; радиус-вектор r , будучи переменной интегрирования, от t не зависит.

Симметризуем выражения (Ia), (IIa), (IIIa), интегрируя по частям первый член правой части каждого из названных уравнений и отбрасывая (как равные нулю) появляющиеся при этом поверхностные интегралы. Мы имеем:

$$\int u^* \text{grad } \dot{u} d\tau = - \int \dot{u} \text{grad } u^* d\tau,$$

$$\int [r, u^* \text{grad } \dot{u}] d\tau = \int [r u^*, \text{grad } \dot{u}] d\tau = - \int [r, \dot{u} \text{grad } u^*] d\tau,$$

$$\int (r, u^* \text{grad } \dot{u}) d\tau = \int (r u^*, \text{grad } \dot{u}) d\tau = - \int (r, \dot{u} \text{grad } u^*) d\tau - 3 \int u^* \dot{u} d\tau.$$

Подставляя это в (Ia), (IIa), (IIIa), находим:

$$\frac{d}{dt} \overline{p} = - \frac{\hbar}{i} \int (\dot{u} \text{grad } u^* - \dot{u}^* \text{grad } u) d\tau, \quad (16)$$

$$\frac{d}{dt} [\overline{r}, p] = - \frac{\hbar}{i} \int [r, \dot{u} \text{grad } u^* - \dot{u}^* \text{grad } u] d\tau, \quad (\text{IIb})$$

$$\frac{d}{dt} (\overline{r p}) = - \frac{\hbar}{i} \int (r, \dot{u} \text{grad } u^* - \dot{u}^* \text{grad } u) d\tau - \frac{3\hbar}{i} \int u^* \dot{u} d\tau. \quad (\text{IIIb})$$

На основании (6) мы имеем:

$$\begin{aligned} \dot{u} \text{grad } u^* - \dot{u}^* \text{grad } u &= - \frac{\hbar}{2im} (\Delta u \text{grad } u^* + \Delta u^* \text{grad } u) + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} (Vu \text{grad } u^* + Vu^* \text{grad } u). \end{aligned} \quad (15)$$

Второе слагаемое справа здесь можно переписать в виде:

$$\frac{1}{i\hbar} \{ \text{grad } (Vu^*u) - u^*u \text{grad } V \}. \quad (16)$$

Будучи подставлен в (16), (IIb), (IIIb), этот член даёт:

$$- \int u^*u \text{grad } V d\tau, \quad (\text{Iв})$$

$$- \int u^*u [r \text{grad } V] d\tau, \quad (\text{IIв})$$

$$- \int u^*u (r \text{grad } V) d\tau - 3 \int u^*u V d\tau. \quad (\text{IIIв})$$

Рассмотрим теперь последний член правой части уравнения (IIIb). Подставляя значение u из (6), можно переписать это слагаемое в виде:

$$- \frac{3\hbar^2}{2m} \int u^* \Delta u d\tau + 3 \int u^*u V d\tau. \quad (\text{IIIв}')$$

Осталось рассмотреть только первое слагаемое в правой части (15). Его вклад соответственно в (16), (II6) и (III6) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int (\Delta u \operatorname{grad} u^* + \Delta u^* \operatorname{grad} u) d\tau, \quad (I\Gamma)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int [r, \Delta u \operatorname{grad} u^* + \Delta u^* \operatorname{grad} u] d\tau, \quad (II\Gamma)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int (r, \Delta u \operatorname{grad} u^* + \Delta u^* \operatorname{grad} u) d\tau. \quad (III\Gamma)$$

Проще и целесообразнее всего вычислить эти интегралы, введя некоторый тензор, который будет подробнее рассмотрен в дополнении 11. С помощью выведенных там формул (3), (4) и (5) мы получаем:

$$(I\Gamma) = 0; \quad (II\Gamma) = 0; \quad (III\Gamma) = \frac{\hbar^2}{2m} \int u^* \Delta u d\tau.$$

Таким образом, окончательно правые части (16), (II6) и (III6) принимают вид:

$$(I\mathfrak{b}) + (I\Gamma) = - \int u^* \operatorname{grad} V u d\tau = - \overline{\operatorname{grad} V}$$

$$(II\mathfrak{b}) + (II\Gamma) = - \int u^* [r, \operatorname{grad} V] u d\tau = - \overline{[r, \operatorname{grad} V]}$$

$$\begin{aligned} (III\mathfrak{b}) + (III\mathfrak{b}') + (III\Gamma) &= - \int u^* (r \operatorname{grad} V) u d\tau - \frac{2\hbar^2}{2m} \int u^* \Delta u d\tau = \\ &= - (r \operatorname{grad} V) + 2\bar{K} \end{aligned} \quad [\text{см. (10)}].$$

Это, однако, не что иное, как волномеханические средние значения правых частей трёх классических уравнений (I), (II), (III). Таким образом, наши утверждения доказаны: в волновой механике закон движения центра тяжести, закон площадей и теорема вириала справедливы для средних значений соответствующих операторов.

Первое из сделанных утверждений было впервые (в несколько специальном виде — для одномерного случая) доказано Эренфестом¹⁾. Последний доказал, что центр тяжести любого волнового пакета движется как классическая материальная точка в соответствии с уравнением (1), если только силу, действующую на каждый элемент волнового пакета, умножить на весовой фактор $|u|^2 d\tau$ и векторно перенести в центр тяжести.

Если, в частности, состояние является стационарным, так что зависимость u и u^* от времени даётся множителем

$$e^{\mp \frac{i}{\hbar} W t},$$

то временные множители в выражении для \bar{p} взаимно компенсируются, и мы получаем законы сохранения

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} = \frac{\partial [r, \bar{p}]}{\partial t} = \frac{\partial (r, \bar{p})}{\partial t} = 0 \quad (17)$$

¹⁾ P. Ehrenfest, Zs. f. Phys. 45, 455 (1927).

(сохранение скорости перемещения центра тяжести и т. д.). Из предыдущего следует, что соотношения (17) равнозначны следующим:

$$\overline{\text{grad } V} = 0, \quad (17a)$$

$$[\overline{r}, \overline{\text{grad } V}] = 0, \quad (17б)$$

$$\overline{(r, \text{grad } V)} = 2\overline{K}. \quad (17в)$$

Смысл первых двух условий хорошо известен из классической механики: равнодействующие всех сил и моментов сил равны нулю. Нас после того как мы обобщим все предыдущие рассуждения на случай системы n частиц (электронов и ядер) будет особенно интересовать уравнение (17в). Указанное обобщение состоит в дословном повторении всех предыдущих рассуждений, в которых только от трёхмерных векторов r , p , $\text{grad } V$, ... надлежит перейти к $3n$ -мерным величинам, а под u , u^* подразумевать решения $3n$ -мерного волнового уравнения. Допустим теперь дополнительно, что все силы, фигурирующие в V , имеют чисто электрическую природу и действуют только между частицами, входящими в состав нашей системы. Тогда мы имеем замкнутую электрическую систему, V представляет собой однородную функцию степени (-1) от всех координат конфигурационного пространства, и по теореме Эйлера

$$(r, \text{grad } V) = -V.$$

Уравнение (17в), справедливое и в этом случае (причём черта сверху означает усреднение по конфигурационному пространству), принимает теперь вид:

$$2\overline{K} = -\overline{V}. \quad (18)$$

Это уравнение содержит утверждение, что волномеханическое среднее значение кинетической энергии замкнутой электрической системы равно половине взятого с обратным знаком волномеханического среднего потенциальной энергии системы. Хорошо известно (см. т. I, приложение 3), как использовалась соответствующая теорема в старой квантовой теории. В старой квантовой теории эта теорема оказывалась справедливой только в среднем во времени, но волномеханический метод замечательным образом включает в себя и это усреднение.

В заключение следует указать ещё одно обобщение всех предыдущих рассуждений. Вместо того чтобы производить вычисления с функциями u , u^* , характеризующими одно состояние, можно взять два произвольных решения уравнений (6) (u и v). Для этого нужно только во всех наших формулах заменить u^* на v , всё прочее остаётся без изменения. Очевидно, для волномеханических средних значений энергии и импульса мы получим вместо (3) и (10):

$$\overline{p} = \int v \text{grad } u \, d\tau; \quad \overline{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int v \Delta u \, d\tau.$$

Если, в частности, воспользоваться двумя собственными функциями (u_n , u_m) какой-нибудь задачи о собственных значениях, полагая $v = u_m^*$, то соотношения (I), (II), (III) превращаются в уравнения для произвольных матричных элементов p_{nm} , $(\text{grad } V)_{nm}$, K_{nm} и т. д. Мы ещё вернёмся к этому вопросу в § 4.

§ 3. ОПЕРАТОРНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ. ОПЕРАТОРЫ ИМПУЛЬСА И МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

В то время как в предыдущем параграфе мы имели дело лишь со средними значениями различных операторов, в настоящем параграфе будут рассматриваться сами эти операторы. Мы будем считать, что их можно представить в виде

$$L = L(q, p) = L\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right); \quad (1)$$

тем самым предполагается, что операторы не зависят явно от времени:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0. \quad (1a)$$

Результаты этого параграфа будут гораздо более глубокими, чем полученные нами раньше. В самом деле, до сих пор мы рассматривали соотношение

$$\int u^* L u d\tau = \bar{L},$$

которое, используя условие нормировки, можно переписать в виде

$$\int u^* L u d\tau = \bar{L} \int u^* u d\tau. \quad (2)$$

Теперь мы постараемся расщепить это соотношение на бесконечное число уравнений, справедливых в любой точке, полагая вместо (2)

$$L u = \lambda u. \quad (3)$$

(Мы пишем λ вместо \bar{L} , ибо указание на производившееся ранее усреднение здесь излишне.) Мы увидим, что таким путём полученные ранее «интегральные» законы (движения центра тяжести и площадей) можно превратить в «дифференциальные» законы большого физического значения.

В словесной формулировке уравнение (3) означает, что при измерении величины L в состоянии u с достоверностью получается значение λ . Таким образом, в данном случае определяется не только среднее значение результатов многих измерений, но и результат одного единственного опыта.

Прежде всего введём несколько общих определений и правил.

Два оператора L и M называются *перестановочными* (или *коммутирующими*), если в применении к любой функции имеет место равенство

$$(LM - ML)v = 0, \quad (4)$$

которое символически можем записать в сокращённом виде

$$LM - ML = 0, \quad \text{т. е. } LM = ML. \quad (4a)$$

Если оператор L перестановочен (коммутирует) с гамильтонианом H , то говорят, что он «сохраняется» (часто употребляется и другое выражение: говорят, что « L является *интегралом движения*»). Основанием для этого служит то обстоятельство, что вероятность обнаружить при измерении L любое заданное значение λ оказывается не зависящей от времени. При этом система, над которой производится измерение, описывается «уравнением движения»

$$Hu = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t}; \quad H = \frac{p^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V. \quad (5)$$

Мы не будем доказывать сделанное утверждение со всей полнотой, а рассмотрим только частный случай, для которого справедливо уравнение (3). В этом случае наше утверждение означает, что $\frac{d\lambda}{dt} = 0$. Чтобы доказать это, продифференцируем уравнение (3) по времени

$$L \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{d\lambda}{dt} u + \lambda \frac{\partial u}{\partial t}$$

(при вычислении левой части использовалась формула (1а)). Учитывая (5), находим:

$$\frac{d\lambda}{dt} u = (L - \lambda) \left(-\frac{i}{\hbar} \right) H u. \quad (5a)$$

По предположению H коммутирует с L и, следовательно, с $L - \lambda$. Поэтому правую часть (5а) можно записать в виде:

$$-\frac{i}{\hbar} H (L - \lambda) u,$$

что равно нулю в силу (3). Итак, действительно, уравнение (5а) означает:

$$\frac{d\lambda}{dt} = 0. \quad (5b)$$

Отметим также (без доказательства), что в силу того же условия перестановочности L и H уравнение (5) обладает решениями u_n , которые вместе с тем являются и собственными функциями оператора L , так что одновременно имеют место равенства:

$$\left. \begin{aligned} H u_n &= W_n u_n, \\ L u_n &= \lambda_n u_n. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Соответствующие волновые функции u_n образуют полную систему.

В качестве первого (вполне тривиального) примера рассмотрим импульс свободной частицы. В данном случае $V = 0$, и, следовательно,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (7)$$

Далее, полагая

$$L = p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

легко видеть, что H и p_x коммутируют:

$$p_x H = H p_x.$$

Таким образом, на основании (6) имеются решения, для которых (мы пишем сейчас π_x вместо λ)

$$p_x u = \pi_x u$$

или в общем виде

$$p u = \pi u. \quad (8)$$

Для этих стационарных решений вектор импульса свободной частицы сохраняется:

$$p = \pi. \quad (8a)$$

Справедливо и обратное: для того чтобы вектор импульса сохранялся, внешние силы должны отсутствовать. В самом деле, если добавить в правую

часть (7) некоторую функцию координат $V(x, y, z)$, то H и p более не будут коммутировать друг с другом [в смысле уравнения (4)], или несколько конкретнее: для того чтобы сохранялась, например, x -компонента импульса, необходимо, чтобы в этом направлении движение частицы было свободным, т. е. чтобы функция V не зависела от x .

Уравнение (8а) аналогично закону инерции классической механики, но это — только символическая аналогия: сохраняется оператор p ; для волнового же поля u отсюда не вытекает никакого закона сохранения: уравнение (8) означает только, что $\text{grad } u$ пропорционален u . В этом отношении полученный здесь «дифференциальный» закон сохранения импульса коренным образом отличается от «интегрального», рассмотренного в предыдущем параграфе. Действительно, последний закон [уравнение (17)] представляет собой вполне определённое утверждение о поведении волнового поля в целом.

В связи с изложенным следует сделать одно методическое замечание. Можно было бы начать интегрирование не с первого, а со второго из уравнений (6). При $L = p$, $\lambda = \pi$ оно приводится к виду

$$\frac{\hbar}{i} \text{grad } u = \pi u \quad (9)$$

и имеет решение

$$u = A(\pi_x, \pi_y, \pi_z) e^{\frac{i}{\hbar}(\pi r)}. \quad (9a)$$

Таким образом, дифференциальное уравнение первого порядка (9) определяет зависимость плоской волны от координат. Подставляя (9а) в волновое уравнение (5) [с гамильтонианом свободной частицы (7)], получаем дифференциальное уравнение первого порядка по времени, определяющее функцию A ; интегрирование его даёт нам зависимость плоской волны от времени:

$$A = ae^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{\pi^2}{2m\hbar}. \quad (10)$$

Таким образом, знание операторов, коммутирующих с H , позволяет упростить волновое уравнение и интегрировать его последовательно, «шаг за шагом». Это обстоятельство аналогично использованию так называемых «первых интегралов» уравнений движения в классической механике.

Переходя к закону сохранения импульса в системе многих частиц, определим, как и в классической механике, полный импульс системы P как сумму импульсов отдельных частиц:

$$P = \sum_{k=1}^N p_k.$$

В переводе на язык операторов это означает:

$$P_x = \frac{\hbar}{i} \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial x_k} \text{ и т. д.} \quad (11)$$

Будем считать, что внешние силы отсутствуют, а силы взаимодействия между частицами системы центральны и имеют потенциал

$$V = \frac{1}{2} \sum_{n, l} V(r_{nl}), \quad n \neq l, \quad 1 \leq n \leq N, \quad 1 \leq l \leq N$$

(множитель $1/2$ включён потому, что каждая пара частиц должна учитываться только один раз). Тогда оператор Гамильтона имеет вид:

$$H = -\hbar^2 \sum_k \frac{\Delta_k}{2m_k} + \frac{1}{2} \sum_{n,l} V(r_{nl}). \quad (12)$$

Первый член здесь явно коммутирует с P_x ; второй же, на первый взгляд, нет. В самом деле, применяя операторы PH и HP к произвольной функции ψ , мы получаем, отбрасывая затем функцию ψ :

$$P_x H = H P_x + \frac{\hbar}{2i} \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{n,l} V(r_{nl}). \quad (13)$$

Однако фактически второй член правой части (13) равен нулю, что мы сейчас и докажем. Прежде всего фигурирующая здесь тройная сумма распадается на две двойные суммы, так как при дифференцировании отличный от нуля результат получится, если k совпадает либо с n , либо с l . Таким образом,

$$\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{n,l} V(r_{nl}) = \sum_n \frac{\partial}{\partial x_n} \sum_l V(r_{nl}) + \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} \sum_n V(r_{nl}). \quad (14)$$

Соберём члены, содержащие один и тот же множитель $\frac{\partial V(r_{nl})}{\partial r_{nl}}$; их вклад в (14) есть

$$\frac{\partial V(r_{nl})}{\partial r_{nl}} \left(\frac{\partial r_{nl}}{\partial x_n} + \frac{\partial r_{nl}}{\partial x_l} \right). \quad (15)$$

По определению величины r_{nl} сумма в скобках в (15) тождественно равна нулю. Следовательно, обращается в нуль и всё выражение (14), и мы получаем из (13):

$$P_x H = H P_x. \quad (16)$$

На основании (5б) отсюда следует, что, как и в классической механике, в отсутствии внешних сил полный импульс системы N материальных точек сохраняется.

Перейдём теперь к закону сохранения момента количества движения (его можно назвать «дифференциальным законом площадей» в отличие от «интегрального» закона, рассмотренного в предыдущем параграфе).

Определим момент количества движения системы частиц M следующим образом:

$$M = \sum_{k=1}^N M_k = \sum_k [r_k p_k], \quad (17)$$

или в операторной форме

$$M_x = \frac{\hbar}{i} \sum_k \left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \text{ и т. д.} \quad (18)$$

Мы утверждаем, что если внешние силы отсутствуют, а силы взаимодействия между частицами системы — центральные, то операторы M_x и H перестановочны. [Оператор Гамильтона H в этом случае имеет вид (12).] Докажем прежде всего, что

$$M_{x,l} \Delta_k = \Delta_k M_{x,l}. \quad (19)$$

При $l \neq k$ это равенство тривиально; при $l = k$ мы имеем (v — произвольная функция)

$$\begin{aligned} \Delta_k M_{zk} v &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) \frac{\hbar}{i} \left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) v = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \Delta_k v + 2 \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial y_k} - \frac{\partial^2}{\partial y_k \partial x_k} \right) v. \end{aligned} \quad (20)$$

Поскольку последний член в (20) тождественно равен нулю, соотношение (19) доказано и для $l = k$.

Суммируя (19) по l , мы приходим к выводу, что и суммарный момент количества движения всей системы $M_z = \sum_l M_{zl}$ также коммутирует с Δ_k ; дальнейшее суммирование по k показывает, что M_z коммутирует и с $\Delta = \sum_k \Delta_k$. Поскольку Δ пропорционально оператору кинетической энергии K , мы получаем окончательно:

$$M_z K = K M_z. \quad (21)$$

Осталось доказать, что такое же равенство имеет место и для оператора потенциальной энергии:

$$M_z V = V M_z; \quad V = \frac{1}{2} \sum_{n \neq l} V(r_{nl}) \quad (n \neq l). \quad (22)$$

Будем исходить из тройной суммы:

$$2M_z V v = \sum_k M_{zk} \sum_{n,l} V(r_{nl}) v,$$

где v — произвольная функция. Заметим прежде всего, что во всех случаях, когда k не равно l или n , $M_{z,k}$ и $V(r_{nl})$ коммутируют по тривиальным причинам. Таким образом, нужно рассмотреть только две двойные суммы с $k = n$ и $k = l$:

$$\begin{aligned} \sum_{n,l} M_{zn} V(r_{nl}) v + \sum_{n,l} M_{zl} V(r_{nl}) v = \\ = \sum_{n,l} \frac{\hbar}{i} \left(x_n \frac{\partial}{\partial y_n} - y_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right) V(r_{nl}) v + \sum_{n,l} \frac{\hbar}{i} \left(x_l \frac{\partial}{\partial y_l} - y_l \frac{\partial}{\partial x_l} \right) V(r_{nl}) v. \end{aligned} \quad (23)$$

Члены, содержащие множитель $\frac{\partial V(r_{nl})}{\partial r_{nl}}$, дают следующий вклад в (23):

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V(r_{nl})}{\partial r_{nl}} \left(x_n \frac{\partial r_{nl}}{\partial y_n} - y_n \frac{\partial r_{nl}}{\partial x_n} + x_l \frac{\partial r_{nl}}{\partial y_l} - y_l \frac{\partial r_{nl}}{\partial x_l} \right) v = \\ = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V(r_{nl})}{\partial r_{nl}} \frac{1}{r_{nl}} \{ x_n (y_n - y_l) - y_n (x_n - x_l) - x_l (y_n - y_l) + \\ + y_l (x_n - x_l) \} v = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, в обеих суммах (23) останутся лишь те слагаемые, в которых дифференцируется не V , а v . Они имеют вид:

$$V(r_{nl}) M_z v$$

и в сумме с членами, в которых $k \neq n$, $k \neq l$, образуют оператор с переставленными сомножителями: $2V M_z v$. Тем самым равенство (22) доказано. Из

(21) и (22) непосредственно следует, что

$$M_z H = H M_z. \quad (24)$$

Аналогичные равенства получаются и для M_x , M_y . Дважды применяя (24) (и соответствующие уравнения с M_x и M_y), легко показать, что и оператор

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \quad (25)$$

перестановочен с H :

$$M^2 H = H M^2. \quad (26)$$

Итак, в свободной системе N частиц, взаимодействующих друг с другом по центральному закону, компоненты (M_x , M_y , M_z) и квадрат M^2 суммарного момента количества движения сохраняются. Этот операторный закон полностью аналогичен классическому закону сохранения момента количества движения.

Пусть теперь заданы два произвольных коммутирующих друг с другом оператора L и M :

$$ML = LM, \quad (27)$$

и пусть нам известны собственные функции u_n и собственные значения λ_n оператора L :

$$Lu_n = \lambda_n u_n. \quad (28)$$

Из (27) и (28) следует:

$$\left. \begin{aligned} MLu_n &= M\lambda_n u_n = \lambda_n Mu_n, \\ LMu_n &= \lambda_n u_n. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Таким образом, Mu_n является собственной функцией L , принадлежащей собственному значению λ_n . Если данному λ_n принадлежит только одна собственная функция u_n («собственное значение не вырождено»), то величина Mu_n должна с точностью до постоянного множителя совпадать с u_n :

$$Mu_n = \text{const} \cdot u_n = M_n u_n. \quad (30)$$

Это означает, что величину M можно точно измерить одновременно с L , причём результат её измерения в состоянии u_n будет равен M_n . Часто это обстоятельство выражают и иначе, говоря, что операторы L и M можно одновременно привести к *диагональному виду*. Основания для употребления такой терминологии будут приведены в дальнейшем, в § 4.

Если данному λ_n принадлежит несколько собственных функций u_{nm} ($m = 1, 2, \dots, \alpha$) («собственное значение вырождено»), то вместо (28) следует написать:

$$Lu_{nm} = \lambda_n u_{nm}. \quad (31)$$

Отсюда, как и раньше, вытекает, что Mu_{nm} является собственной функцией оператора L , принадлежащей собственному значению λ_n . Однако теперь она представляет собой, вообще говоря, линейную комбинацию функций u_{nm} :

$$Mu_{nm} = \sum_{\mu=1}^{\alpha} C_{n\mu}^{(m)} u_{n\mu}. \quad (32)$$

Можно показать (мы опускаем доказательство), что, выбирая в качестве новых собственных функций v_{nm} подходящие линейные комбинации из u_{nm} , можно представить уравнения (31) и (32) в более простом виде:

$$Lv_{nm} = \lambda_n v_{nm}, \quad (31a)$$

$$Mv_{nm} = M_{nm} v_{nm}. \quad (32a)$$

Итак, операторы L и M можно и при наличии вырождения одновременно привести к диагональному виду.

Высказанные теоремы позволяют глубже понять смысл равенств (24) и (26). Заметим прежде всего, что различные компоненты M не перестановочны друг с другом. Простое вычисление показывает, что

$$M_x M_y - M_y M_x = -\frac{\hbar}{i} M_z \quad (33)$$

[аналогичные соотношения между другими компонентами получаются из (33) циклической перестановкой индексов].

Действительно, применим левую часть (33) к произвольной функции ψ . Опуская множитель $\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2$, мы получаем:

$$\begin{aligned} \sum_k \left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) \sum_l \left(z_l \frac{\partial}{\partial x_l} - x_l \frac{\partial}{\partial z_l} \right) \psi - \\ - \sum_k \left(z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right) \sum_l \left(y_l \frac{\partial}{\partial z_l} - z_l \frac{\partial}{\partial y_l} \right) \psi. \end{aligned}$$

Очевидно, после вычитания второй строчки из первой остаются только члены с $k=l$, возникающие при применении к z оператора $\frac{\partial}{\partial z}$. Они имеют вид:

$$\sum_k \left(y_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) = -\frac{i}{\hbar} M_z,$$

откуда [после умножения на $\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2$] и вытекает равенство (33). Отсюда следует, что можно диагонализировать (и, следовательно, точно измерить) лишь какую-нибудь одну из компонент момента количества движения; остальные же компоненты при этом не приводятся к диагональному виду.

С другой стороны, из (33) следует, что

$$M_{x,y,z} M^2 = M^2 M_{x,y,z}, \quad (34)$$

где оператор M^2 определен равенством (25). Чтобы доказать, например, соотношение $M_x M^2 = M^2 M_x$, рассмотрим операторы $M_x M_y^2$ и $M_x M_z^2$.

Первый из них, дважды применяя формулу (33), можно преобразовать следующим образом:

$$M_x M_y^2 = -\frac{\hbar}{i} M_x M_y + M_y M_x M_y = -\frac{\hbar}{i} (M_x M_y + M_y M_x) + M_y^2 M_x.$$

Таким образом,

$$M_x M_y^2 - M_y^2 M_x = -\frac{\hbar}{i} (M_x M_y + M_y M_x). \quad (34a)$$

Точно так же находим, пользуясь уравнением, получающимся из (33) циклической перестановкой:

$$M_x M_z^2 = +\frac{\hbar}{i} M_y M_z + M_z M_x M_z = +\frac{\hbar}{i} (M_y M_z + M_z M_y) + M_z^2 M_x.$$

Отсюда

$$M_x M_z^2 - M_z^2 M_x = +\frac{\hbar}{i} (M_y M_z + M_z M_y); \quad (34b)$$

и сумма (34а) и (34б) даёт:

$$M_x(M_y^2 + M_z^2) - (M_y^2 + M_z^2)M_x = 0.$$

Следовательно, и

$$M_x M^2 - M^2 M_x = 0.$$

Равенства (24), (26) и (34) показывают, что можно одновременно привести к диагональному виду, например, M_x , M^2 и H . Иначе говоря, можно одновременно положить:

$$M_x = M, \quad M^2 = \Delta, \quad H = W_n. \quad (35)$$

Как мы сейчас увидим, именно на этом основан известный из спектроскопии факт, что стационарное состояние атомной системы характеризуется заданием магнитного и азимутального квантовых чисел.

Как будет подробнее показано в приложении 12, $\frac{i}{\hbar} M_x$ представляет собой не что иное, как оператор поворота всей системы электронов вокруг оси z :

$$M_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (36)$$

Желая привести M_x к диагональному виду, потребуем, чтобы [см. (30)]:

$$M_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = M \psi. \quad (36a)$$

Интегрируя, получаем отсюда [ср. (9) и (9а)]:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} M \varphi} \dots, \quad (36b)$$

где многоточие означает зависимость ψ от других переменных. Требование однозначности функции ψ приводит к *квантовому условию*:

$$M = M \hbar, \quad (37)$$

где M — целое число (магнитное квантовое число).

Это условие имеет место и при наличии внешнего магнитного поля, параллельного оси z . M_x и в этом случае приводится к диагональному виду; составляющая момента количества движения в направлении магнитного поля является интегралом движения, и магнитное квантовое число M сохраняет своё значение.

В приложении 12 будет показано, что собственные значения Δ оператора M^2 даются формулой

$$\Delta = \hbar^2 L(L+1), \quad L \text{ — целое число}; \quad (38)$$

L представляет собой квантовое число, характеризующее суммарный орбитальный момент количества движения (в нашей прежней терминологии — азимутальное квантовое число).

Итак, мы действительно приходим к упомянутому ранее выводу: состояния атомной системы (H диагонально) можно нумеровать с помощью квантовых чисел M и L . Вместе с тем доказана и справедливость векторной модели (т. I, гл. VI, § 5): M представляет собой (в пренебрежении спином!) целочисленную «проекцию» L на направление поля с той волномеханической поправкой, что величину L^2 надо заменить на $L(L+1)$.

Подчеркнём, что мы достигли заметного прогресса по сравнению с уравнениями (2) и (3) § 10 гл. II. Там мы ограничивались рассмотрением одноэлектронной системы, заменяли потенциальную энергию её усреднённым значением $V(r)$ и производили интегрирование в угловых переменных, как в задаче об атоме водорода. Таким путём мы пришли к квантовым числам m, l и к соответствующим правилам отбора. В противоположность этому теперь мы полностью учитываем взаимодействие между электронами $V(r_{ik})$. Квантовые числа, обозначаемые теперь через M и L , представляют собой характеристики не одного отдельного электрона, а всей многоэлектронной системы. Операторное исчисление сослужило нам при этом обобщении хорошую службу.

§ 4. СОПРЯЖЁННЫЕ ОПЕРАТОРЫ. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В § 7 гл. I мы определили уравнение, сопряжённое с волновым, с помощью «условия полной интегрируемости» (1.7.1):

$$vL(u) - uM(v) = \operatorname{div} S. \quad (1)$$

Здесь L представляет собой «волновой оператор» (т. е. левую часть уравнения Шредингера общего вида), M — сопряжённый с ним оператор. Мы показали, что всегда (в том числе и для временного уравнения Шредингера, и для уравнения, содержащего вектор-потенциал):

$$M = L^*, \quad (2)$$

т. е. сопряжённый волновой оператор совпадает с комплексно-сопряжённым. Исследуем теперь в общем виде вопрос об операторе, сопряжённом с произвольным оператором L , заданным в виде (3.1), (3.1a):

$$L\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right). \quad (3)$$

Прежде всего рассмотрим простейшие случаи — операторы импульса и момента количества движения:

$$L = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{или соответственно} \quad L = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (3a)$$

Очевидно, в первом случае мы имеем (u, v — произвольные функции)

$$v \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar}{i} uv \right) - u \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} v, \quad (4)$$

откуда в соответствии с (1)

$$M(v) = - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} v = \frac{\hbar}{-i} \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \text{т. е. } M = L^*. \quad (5)$$

Во втором случае мы получаем:

$$v \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial u}{\partial y} - y \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\hbar}{i} v x u \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar}{i} v y u \right) - u \left(\frac{\partial}{\partial y} v \frac{\hbar}{i} x - \frac{\partial}{\partial x} v \frac{\hbar}{i} y \right),$$

т. е. на основании (1)

$$M(v) = \frac{\hbar}{-i} \left(\frac{\partial}{\partial y} x - \frac{\partial}{\partial x} y \right) v. \quad (6)$$

Это можно записать в виде

$$M = \frac{\hbar}{-i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = L^*. \quad (7)$$

Перестановка операторов, произведённая в (7), вообще говоря, не всегда возможна. Наоборот, как правило, при перемножении операторов играет существенную роль порядок следования сомножителей. В сопряжённом операторе он точно противоположен порядку следования сомножителей в исходном операторе.

В этом легко убедиться, представив оператор L в виде суммы членов вида

$$f(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^x f_1(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^\lambda f_2(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_3} \right)^\mu f_3(q) \quad (8)$$

и составляя в соответствии с (1) операторы, сопряжённые к этим слагаемым. Замечая, что $f(q)$, $f_1(q)$, ... суть обычные функции координат q_1 , q_2 , q_3 , мы получаем:

$$f_3(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_3} \right)^\mu f_2(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^\lambda f_1(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^x f(q) (-1)^{x+\lambda+\mu}. \quad (9)$$

Последний сомножитель $(-1)^{x+\lambda+\mu}$ определяется числом содержащихся здесь производных и может быть разделён на i . Однако порядок следования функций f и операций дифференцирования $\frac{\partial}{\partial q}$ в (8) и (9) остаётся различным.

Таким образом, (9), вообще говоря, нельзя получить из (8) переходом к комплексно-сопряжённому выражению, и, следовательно, равенство $M = L^*$, вообще говоря, не выполняется.

Мы покажем, однако, что из физических соображений необходимо ограничиваться именно специальным случаем $M = L^*$. Для этого положим $v = u^*$, $M = L^*$ и, отбрасывая член с дивергенцией (который всё равно даёт нуль при последующем интегрировании), перепишем (1) в виде:

$$u^* L(u) = u M(u^*) = u L^*(u^*). \quad (10)$$

Отсюда получаем, интегрируя по всему конфигурационному пространству,

$$\bar{L} = \int u^* L(u) d\tau = \int u L^*(u^*) d\tau = \bar{L}^*. \quad (11)$$

Таким образом, в данном случае волномеханическое среднее значение оператора L равно своему комплексно-сопряжённому, т. е. *вещественно*. То же относится и к собственным значениям таких операторов. В самом деле, если $L(u) = \lambda u$, то из (11) и условия нормировки немедленно вытекает

$$\lambda = \lambda^* = \text{вещественному числу}. \quad (12)$$

Итак, хотя с точки зрения математики операторы, удовлетворяющие условию (2), представляют исключительный случай, только они и интересны для наших целей. Чтобы волномеханическое среднее значение любого оператора имело физический смысл, оно должно быть вещественным. Поэтому в волновой механике допустимы только операторы, комплексно-сопряжённые к своим сопряжённым. В частности, этому условию удовлетворяют операторы импульса и момента количества движения, а также волновой оператор.

В конце § 2 мы ввели в рассмотрение, помимо средних значений операторов в данном состоянии u , также и волновомеханические средние, соответствующие переходам между двумя различными состояниями u и v . Соответственно и для произвольного оператора L , помимо уже рассмотренных средних значений

$$\bar{L} = \int u^* L(u) d\tau, \quad (13)$$

исследуем выражения

$$\bar{L} = \int v L(u) d\tau. \quad (14)$$

Их можно было бы назвать «элементами перехода» [в отличие от «элементов состояния» (13)]. Вообще говоря, как те, так и другие зависят от времени.

Пусть, в частности, состояния u , v стационарны:

$$u = u_n = \psi_n e^{-i\omega_n t}; \quad v = u_m^* = \psi_m^* e^{+i\omega_m t}.$$

Тогда (13) вообще не зависит от времени, а (14) содержит только экспоненциальный множитель

$$e^{-i(\omega_n - \omega_m)t}. \quad (15)$$

В этом случае удобно с самого начала исключить из рассмотрения временную зависимость \bar{L} и ввести величину (без черты сверху)

$$L_{mn} = \int \psi_m^* L(\psi_n) d\tau, \quad (16)$$

$$L_{nn} = \int \psi_n^* L(\psi_n) d\tau. \quad (16a)$$

Как и в § 2, мы будем называть их *матричными элементами*. Название связано с тем, что величины L_{mn} можно представлять себе расположенными в различных клетках бесконечной таблицы (матрицы), причём в горизонтальном направлении изменяется индекс n , а в вертикальном направлении m . Величины (16a) расположены на диагонали этой матрицы («диагональные элементы»), а (16) — выше и ниже диагонали.

Здесь следует сделать одно замечание, относящееся к случаю *вырождения*, т. е. к тому часто встречающемуся случаю, когда одному собственному значению M_m (или W_n) принадлежит несколько собственных функций. Мы обозначим их посредством $\psi_{m1} \dots \psi_{mx} \dots$ или соответственно $\psi_{n1} \dots \psi_{n\beta}$.

Таким образом, вместо (16) и (16a) нужно написать:

$$L_{m\alpha, n\beta} = \int \psi_{m\alpha}^* L(\psi_{n\beta}) d\tau, \quad (17)$$

$$L_{n\alpha, n\beta} = \int \psi_{n\alpha}^* L(\psi_{n\beta}) d\tau, \quad (17a)$$

в частности, при $\alpha = \beta$

$$L_{n\alpha, n\alpha} = \int \psi_{n\alpha}^* L(\psi_{n\alpha}) d\tau. \quad (17b)$$

Эти матричные элементы располагаются теперь в расширенной двумерной таблице, клетки которой нумеруются индексами $m\alpha$, $n\beta$. Величины (17b) располагаются, естественно, по диагонали этой таблицы. Мы покажем сейчас, что если L и H перестановочны, то медианальные матричные элементы (17) обращаются в нуль.

Положим в соответствии со сделанным предположением:

$$LH = HL, \quad (18a)$$

$$H\psi_{n\beta} = W_n\psi_{n\beta}, \quad (18b)$$

$$H\psi_{m\alpha} = W_m\psi_{m\alpha}. \quad (18v)$$

На основании (17) мы получаем, используя (18a) и (18b):

$$\begin{aligned} W_n L_{m\alpha, n\beta} &= \int \psi_{m\alpha}^* L W_n \psi_{n\beta} d\tau = \int \psi_{m\alpha}^* L H \psi_{n\beta} d\tau = \\ &= \int \psi_{m\alpha}^* H L \psi_{n\beta} d\tau = \int (H \psi_{m\alpha}^*) L \psi_{n\beta} d\tau. \end{aligned}$$

(Последнее равенство получается интегрированием по частям.) Пользуясь теперь (18v), находим окончательно:

$$W_n L_{m\alpha, n\beta} = W_m L_{m\alpha, n\beta}. \quad (19)$$

Однако это невозможно, так как $W_n \neq W_m$. Следовательно, матричные элементы (17) должны обращаться в нуль, что и требовалось доказать.

К элементам (17a) это утверждение не относится, так как при $n = m$ равенство (19) представляет собой тождество. Однако их тоже можно обратить в нуль, если, во-первых, выбрать $\psi_{n\alpha}$, $\psi_{n\beta}$ ортогональными друг другу (это всегда возможно) и, во-вторых, «привести L к диагональному виду», т. е. потребовать, чтобы $\psi_{n\beta}$ были собственными функциями не только H , но и L :

$$L\psi_{n\beta} = \lambda_{n\beta}\psi_{n\beta}.$$

В самом деле, в этом случае (17a) даёт:

$$L_{n\alpha, n\beta} = \lambda_{n\beta} \int \psi_{n\alpha}^* \psi_{n\beta} d\tau.$$

Мы видим, таким образом, что в матрице (17) только диагональные члены отличны от нуля. Этим и выясняется смысл введённого в § 3 (стр. 155) термина «одновременное приведение к диагональному виду».

§ 5. МАТРИЧНАЯ МЕХАНИКА. ПРИМЕР С ОСЦИЛЛЯТОРОМ

Двумерная схема (4. 16, 16a) представляет собой один из возможных способов описания стационарных состояний атомных систем. Действительно, задав все «элементы состояния» L_{nn} и «элементы перехода» L_{mn} , мы тем самым узнаём вообще всё, что можно сказать о данной механической величине L . Исследовав таким же образом все остальные механические величины, мы получаем сведения о всех свойствах нашей атомной системы. Эта идея лежит в основе первой формулировки квантовой механики — *матричной механики* Гейзенберга ¹⁾.

Правила вычислений с матрицами мы получим из соответствующих операторных уравнений.

Ход рассуждений удобно выяснить на простейшем примере: рассматривая «правило перестановки» операторов p_x и x

$$p_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i} \quad (1a)$$

¹⁾ W. Heisenberg, *Zs. f. Phys.* **33**, 879 (1925); Born u. Jordan, там же **34**, 858 (1926); Born, Heisenberg u. Jordan, там же **35**, 557 (1926).

и вытекающее из него матричное уравнение

$$(p_{\omega}x)_{mn} - (xp_{\omega})_{mn} = \frac{\hbar}{i} \delta_{mn}. \quad (16)$$

Для доказательства соотношения (1а) умножим его справа на произвольную функцию v ; тогда в силу определения оператора p_{ω} получается тождество

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(xv) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} v.$$

Для доказательства (16) умножаем (1а) слева на ψ_m^* , справа — на ψ_n и интегрируем по всему конфигурационному пространству. Тогда слева возникают матричные элементы произведений $p_{\omega}x$ и xp_{ω} , а справа при $\frac{\hbar}{i}$ появляется множитель

$$\int \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn}$$

в соответствии с (16).

Далее, постараемся выразить матричные элементы от произведений [фигурирующие, например, в левой части (16)] через матричные элементы отдельных сомножителей. Проведем это для случая двух произвольных операторов L и M . По определению мы имеем:

$$(LM)_{mn} = \int \psi_m^* LM \psi_n d\tau. \quad (2)$$

Величину $M\psi_n$ представим в виде ряда по собственным функциям

$$M\psi_n = \sum_i A_{in} \psi_i. \quad (2a)$$

В силу ортогональности и нормировки функций ψ_n для коэффициентов A_{in} мы получаем (подобно тому, как это делается в случае рядов Фурье):

$$\left. \begin{aligned} A_{in} &= \int \psi_i^* M \psi_n d\tau = M_{in}, \\ M \psi_n &= \sum_i A_{in} \psi_i. \end{aligned} \right\} \quad (2b)$$

Подставляя это в (2), находим:

$$(LM)_{mn} = \sum_i \int \psi_m^* L \psi_i d\tau M_{in}.$$

Итак, мы получили основное *правило умножения*:

$$(LM)_{mn} = \sum_i L_{mi} M_{in}. \quad (3)$$

Оно аналогично известному правилу умножения детерминантов или правилу «матричной алгебры» (под словом «матрица» здесь подразумевается таблица членов детерминанта, содержащая конечное или бесконечное число строк и столбцов). Из соотношения (3) видно, что, вообще говоря,

$$(LM)_{mn} \neq (ML)_{mn}. \quad (3a)$$

Матричное умножение не коммутативно.

Пусть теперь M или L будет оператором Гамильтона H , для которого, в силу (2.13а, б):

$$H_{nn} = W_n; \quad H_{nj} = 0 \quad (4)$$

(по определению собственных значений и собственных функций H). Тогда на основании (3) мы получаем:

$$(LH)_{mn} = W_n L_{mn}; \quad (HM)_{mn} = W_m M_{mn}. \quad (4a)$$

[Это можно было бы вывести и непосредственно из определения (2).]

Обратимся теперь к вопросу о дифференцировании по времени в матричном исчислении. Естественно, при этом надо исходить не из соотношения (4.16), в котором исключена временная зависимость, а из содержащего время определения (4.14). Иначе говоря, вместо ψ_n, ψ_n^* надо писать u_n, u_n^* , где

$$u_n = e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} \psi_n.$$

Будем также, возвращаясь к прежним обозначениям, писать \bar{L} вместо L . Поскольку зависимость \bar{L} от времени определяется множителем (4.15) мы имеем:

$$\dot{\bar{L}}_{mn} = i(\omega_m - \omega_n) \bar{L}_{mn} = i\omega_{mn} \bar{L}_{mn}. \quad (5)$$

Здесь ω_{mn} — «частота перехода» для перехода $m \rightarrow n$ — определена соотношением

$$\omega_{mn} = \frac{W_m - W_n}{\hbar} = -\omega_{nm}. \quad (5a)$$

Итак, если образовывать матрицы с помощью волновых функций стационарных состояний u_n, u_m , то дифференцирование по времени сводится просто к умножению на $i\omega_{mn}$.

Это же обстоятельство можно выразить в неявной форме, полагая

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\bar{L}}_{mn} = (\bar{H}\bar{L})_{mn} - (\bar{L}H)_{mn}. \quad (6)$$

Действительно, подставляя в правую часть (6) значения (4a), мы вновь приходим к уравнению (5).

Заметим в заключение, что для всех операторов, имеющих физический смысл (см. стр. 159), справедливо уравнение (4.2). В матричной записи это означает в соответствии с (4.10) и (4.11):

$$\bar{L}_{mn} = \int u_m^* L(u_n) d\tau = \int u_n L^*(u_m^*) d\tau = \bar{L}_{nm}^*. \quad (7)$$

При перестановке индексов зависящие от времени элементы \bar{L} (а следовательно, и не зависящие от времени матричные элементы L) превращаются в комплексно-сопряжённые величины.

Итак, в наших матрицах по обеим сторонам диагонали, в симметричных относительно неё клетках, стоят комплексно-сопряжённые величины: матрицы являются «эрмитовскими».

Таким образом, аппарат матричной механики построен. Мы проиллюстрируем его применение на примере задачи о линейном осцилляторе.

В данном случае оператор Гамильтона имеет вид [см. (1.9.1)]:

$$H = \frac{1}{2\mu} (p^2 + \mu^2 \omega_0^2 q^2). \quad (8)$$

Здесь ω_0 — классическая частота колебаний, μ — масса; координата вместо x обозначена буквой q .

На основании (6) мы имеем для всех значений индексов m, n (индексы не пишем):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \dot{p} &= Hp - pH = \frac{\mu}{2} \omega_0^2 (\overline{q^2 p} - \overline{p q^2}), \\ \frac{\hbar}{i} \dot{q} &= Hq - qH = \frac{1}{2\mu} (\overline{p^2 q} - \overline{q p^2}). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Дважды применяя перестановочное соотношение (1а), находим:

$$pq^2 = qpq + \frac{\hbar}{i} q = q^2 p + 2 \frac{\hbar}{i} q,$$

т. е.

$$q^2 p - pq^2 = -2 \frac{\hbar}{i} q. \quad (10a)$$

Далее,

$$p^2 q = pqp + \frac{\hbar}{i} p = qp^2 + 2 \frac{\hbar}{i} p,$$

откуда

$$p^2 q - qp^2 = +2 \frac{\hbar}{i} p. \quad (10б)$$

Эти уравнения справедливы как для [фигурирующих в (9)] зависящих, так и для не зависящих от времени матриц.

Подставляя (10 а, б) в (9) получаем (явно выписывая индексы у матриц):

$$\left. \begin{aligned} \dot{p}_{mn} &= -\mu \omega_0^2 \overline{q_{mn}}, \\ \dot{q}_{mn} &= +\frac{1}{\mu} \overline{p_{mn}}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Первое из этих уравнений означает в матричной форме, что изменение импульса со временем определяется действующей силой (в данном случае — квазиупругой возвращающей силой); второе является определением импульса (как произведения массы на скорость). Вместе с (8) соотношения (11) представляют собой — и по форме и по содержанию — не что иное, как уравнения Гамильтона для осциллятора, записанные в матричном виде.

Переходя к интегрированию уравнений (11), заметим прежде всего, что диагональные элементы p_{nn} и q_{nn} не зависят от времени. Поэтому левые (а следовательно, и правые) части (11) обращаются в нуль, и мы получаем:

$$q_{nn} = 0, \quad p_{nn} = 0. \quad (12)$$

Далее, дифференцируя (11) по времени, исключаем p и получаем аналог элементарного «уравнения движения»:

$$\mu \ddot{q}_{mn} = -\mu \omega_0^2 \overline{q_{mn}}. \quad (13)$$

откуда на основании (5)

$$(\omega_{mn}^2 - \omega_0^2) q_{mn} = 0. \quad (14)$$

Следовательно, имеет место одно из двух: либо

$$q_{mn} = 0, \quad (15)$$

либо

$$\omega_{mn} = \pm \omega_0. \quad (16)$$

Иначе говоря, исчезают все матричные элементы q_{mn} , кроме тех, для которых $\omega_{mn} = +\omega_0$ или $-\omega_0$. Это обстоятельство удобно выразить, введя

специальный порядок нумерации строк и столбцов в матрицах, который до сих пор оставался совершенно произвольным. Именно, условимся считать, что

$$\left. \begin{aligned} \omega_{mn} &= +\omega_0 \text{ для перехода } m \rightarrow m-1; \\ \omega_{mn} &= -\omega_0 \text{ для перехода } m \rightarrow m+1. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Таким образом, в первом случае $n = m - 1$, во втором $n = m + 1$. Соответственно для q мы получаем на основании (16):

$$\left. \begin{aligned} q_{mn} &= 0 \text{ при } n \neq m \mp 1, \\ q_{mn} &\neq 0 \text{ при } n = m \mp 1. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Итак, при данной нумерации строк и столбцов отличны от нуля лишь матричные элементы q , соседние с диагональю. Все остальные (диагональные, для которых $m = n$, и не соседние с диагональю, для которых $|n - m| > 1$) обращаются в нуль.

Для определения матричных элементов q , соседних с диагональю, воспользуемся перестановочным соотношением (16). При $n = m$ оно имеет вид:

$$(pq)_{mm} - (qp)_{mm} = \frac{\hbar}{I}, \quad (19)$$

или, в силу правила умножения (3):

$$\sum_l (p_{ml}q_{lm} - q_{ml}p_{lm}) = \frac{\hbar}{I}.$$

Воспользовавшись ещё вторым уравнением (11) в форме

$$p_{mi} = i\omega_{mi}q_{mi}, \quad (19a)$$

мы получаем вместо (19):

$$\mu I \sum_l (\omega_{ml}q_{ml}q_{lm} - q_{ml}\omega_{lm}q_{lm}) = \frac{\hbar}{I}. \quad (19b)$$

Поскольку $\omega_{lm} = -\omega_{ml}$, это можно записать в более удобном виде:

$$\sum_l \omega_{ml}q_{ml}q_{lm} = -\frac{\hbar}{2\mu}. \quad (20)$$

Благодаря (17) и (18) в сумме по l остаются только два члена: соответственно $l = m - 1$ ($\omega_{ml} = +\omega_0$) и $l = m + 1$ ($\omega_{ml} = -\omega_0$). Таким образом, уравнение (20) принимает вид:

$$q_{m, m-1}q_{m-1, m} - q_{m, m+1}q_{m+1, m} = -\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}.$$

На основании (7) можно утверждать, что стоящие в левой части произведения вещественны и положительны: они равны «нормам» (т. е. квадратам модулей) соответствующих матричных элементов. Поэтому вместо предыдущего равенства можно написать:

$$|q_{m+1, m}|^2 - |q_{m, m-1}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega_0}. \quad (21)$$

Отсюда следует, что величины $|q|^2$ образуют арифметическую прогрессию; сверху она не ограничена, но снизу обязательно обрывается, так как все

члены прогрессии положительны. Поскольку до сих пор мы распорядились только разностями индексов n и m , а абсолютные их значения пока произвольны, наше право оборвать ряд на любых значениях индексов. Таким образом, можно считать, что последним неисчезающим членом является $q_{1,0}$, а $q_{0,-1}$ обращается в нуль. Тогда уравнение (21) даёт (при $m = 0, 1, \dots, n$):

$$|q_{1,0}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega_0}, \quad |q_{2,1}|^2 = \frac{2\hbar}{2\mu\omega_0}, \quad |q_{n,n-1}|^2 = \frac{n\hbar}{2\mu\omega_0}. \quad (21a)$$

Тем самым определяются абсолютные значения комплексных чисел q_{mn} фазы [обозначаемые в (22) посредством β], как всегда, остаются неопределёнными. Принимая во внимание зависимость матричных элементов от времени, мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} q_{n,n-1} &= \sqrt{\frac{n\hbar}{2\mu\omega_0}} e^{i(\omega_0 t + \beta_{n,n-1})}, \\ q_{n,n+1} &= \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2\mu\omega_0}} e^{-i(\omega_0 t + \beta_{n,n+1})}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Обратимся теперь к выражению (8) для энергии, которое в матричной форме принимает вид диагональной матрицы с индексами n, n . Первое слагаемое в H в силу (19a) и правила умножения (3) можно записать как

$$\frac{1}{2\mu} p_{nn}^2 = -\frac{\mu}{2} \sum_l \omega_{nl} q_{nl} \omega_{ln} q_{ln} = \frac{\mu}{2} \sum_l \omega_{nl}^2 |q_{nl}|^2.$$

Аналогично получаем для второго слагаемого:

$$\frac{\mu}{2} \omega_0^2 q_{nn}^2 = \frac{\mu}{2} \sum_l \omega_0^2 |q_{nl}|^2.$$

Таким образом, из уравнения (8) следует:

$$H_{nn} = \frac{\mu}{2} \sum_l (\omega_{nl}^2 + \omega_0^2) |q_{nl}|^2.$$

Благодаря присутствию множителей $|q_{nl}|^2$ из всей этой суммы (как и раньше в аналогичном случае) остаются только два члена, в которых $l = n \pm 1$. В силу (17) и (21a) мы получаем:

$$H_{nn} = \mu\omega_0^2 (|q_{n,n+1}|^2 + |q_{n,n-1}|^2) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0. \quad (23)$$

Аналогичным путём можно вычислить и недиагональные элементы и убедиться, что все они равны нулю.

Найденные в (23) диагональные элементы матрицы H (т. е. собственные значения энергии) точно совпадают с соответствующими значениями (1. 5. 10), определёнными с помощью волновой механики. Напротив, как часто подчёркивается, наш результат отличается от старой квантовой теории осциллятора в том отношении, что у нас фигурируют не «целые», а «полуцелые» квантовые числа.

Какой же из двух методов проще, аналитический — волномеханический или алгебраический — квантомеханический? Отвлекаясь от привычки к аналитическим методам, не следует ли сказать, что алгебраический метод квантовой механики основан на более элементарных операциях? В принципе проще иметь дело со счётным множеством дискретных элементов, чем с континуумом. С другой стороны, в задачах со многими степенями свободы матричные ин-

дексы нагромождаются так, что вычисления становятся необозримыми, а формулы громоздкими.

И действительно, как раз важнейшие задачи (проблема Кеплера, эффекты Зеемана и Штарка) впервые получили своё полное решение именно на волномеханическом пути. Дело обстоит здесь так же, как в теории функций, где специальные элементарные методы Вейерштрасса оказались менее удобными, чем методы Коши и Римана.

Явно высказанной целью первой работы Гейзенберга по квантовой механике было развить методы, которые «... были бы основаны исключительно на соотношениях между принципиально наблюдаемыми величинами». Такие понятия, как «координата электрона», «период обращения», «форма орбиты», следует исключить из рассмотрения. Это стремление ограничиться непосредственно наблюдаемыми величинами основано в конечном счёте на философии Маха. Сорок лет назад при непосредственном участии самого Маха оно приводило к пропаганде так называемой энергетики, согласно которой наблюдаемыми и имеющими физический смысл величинами считались только изменения энергии в различных процессах. Однако энергетике противостоила столь плодотворная кинетическая теория газов, в которой координаты и скорости газовых молекул, хотя и не наблюдаемые для одного единичного атома, всё же неизбежно должны были рассматриваться как величины, определяющие состояние системы. Совершенно так же точке зрения Гейзенберга можно противопоставить волновую механику, в которой волновая функция столь же мало подвержена экспериментальному наблюдению, сколь и отдельные электронные орбиты прежней теории.

Впрочем, следует заметить, что и в схеме квантовой механики имеется ненаблюдаемая величина — фаза матричного элемента [см. уравнение (22)]. Равным образом и в волновой механике мы встречаемся с произвольным фазовым множителем¹⁾, который не определяется условием нормировки волновой функции [см. гл. I, уравнение (7.11)].

§ 6. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЕЙ

Рассматривая в § 1 движение свободной частицы, мы уже видели, что ограничение возможных значений координат частицы неизбежно приводит к некоторому «разбросу» значений её импульса.

Чтобы вывести общее соотношение между неточностями в определении координаты и импульса, условимся прежде всего относительно величины, характеризующей неточность измерения (т. е. «разброс» значений наблюдаемой величины около некоторого среднего). Пусть мгновенное отклонение координаты частицы от её среднего значения (от центра тяжести волнового пакета \bar{x}) будет $x - \bar{x}$. Мы получим меру среднего отклонения x от \bar{x} , составляя волномеханическое среднее значение величины $(x - \bar{x})^2$. Вводя ещё множитель 2, мы определим квадрат средней «ширины распределения по координатам» формулой

$$(\Delta x)^2 = 2 \overline{(x - \bar{x})^2}. \quad (1)$$

В случае свободной частицы (§ 1) Δx совпадает с шириной волнового пакета b .

¹⁾ Дираку [P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 133, 60 (1931)] принадлежит интересная попытка определить этот фазовый множитель и выяснить его физический смысл.

Аналогично квадрат «средней ширины распределения по импульсам» есть

$$(\Delta p_x)^2 = 2 \overline{(p_x - \bar{p}_x)^2}. \quad (2)$$

Мы докажем сейчас, что всегда имеет место соотношение

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar. \quad (3)$$

Заметим прежде всего, что

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 = \bar{p}_x^2 - 2\bar{p}_x \cdot \bar{p}_x + \bar{p}_x^2 \quad (4)$$

можно переписать в виде:

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 = \bar{p}_x^2 - \bar{p}_x^2. \quad (5)$$

Мы, однако, воспользуемся сначала формулой (4) и вычислим последовательно все три члена, фигурирующих в правой части этого выражения (интегралы по бесконечно удалённой поверхности, как всегда, будут опускаться). Мы имеем:

$$\bar{p}_x^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \int u^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} d\tau = -\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \int \frac{\partial u^*}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} d\tau; \quad (6a)$$

$$-2\bar{p}_x \bar{p}_x = -2\bar{p}_x \frac{\hbar}{i} \int u^* \frac{\partial u}{\partial x} d\tau = -\frac{\hbar}{i} \bar{p}_x \int u^* \frac{\partial u}{\partial x} d\tau + \frac{\hbar}{i} \bar{p}_x \int \frac{\partial u^*}{\partial x} u d\tau; \quad (6b)$$

$$\bar{p}_x^2 = \bar{p}_x^2 \int u^* u d\tau. \quad (6в)$$

Легко видеть, что сумму правых частей этих равенств можно записать следующим образом (\bar{p}_x — вещественное число):

$$\hbar^2 \int \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{i}{\hbar} \bar{p}_x u^* \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{i}{\hbar} \bar{p}_x u \right) d\tau = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{i}{\hbar} \bar{p}_x u \right|^2 d\tau.$$

Таким образом, формула (4) принимает вид:

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{i}{\hbar} \bar{p}_x u \right|^2 d\tau. \quad (7)$$

Вид подынтегрального выражения в (7) подсказывает, что уместно ввести новую функцию:

$$\varphi = u e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{p}_x x}. \quad (8)$$

Тогда вместо (7) мы получаем:

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|^2 d\tau. \quad (9)$$

Далее мы имеем [учитывая (8)]

$$\frac{1}{2} (\Delta x^2) = \int u^* (x - \bar{x})^2 u d\tau = \int |(x - \bar{x}) u|^2 d\tau = \int |(x - \bar{x}) \varphi|^2 d\tau. \quad (10)$$

Введём вместо x , y , z (мы рассматриваем пока только случай одной частицы) «относительные» координаты:

$$\xi = x - \bar{x}, \quad \eta = y - \bar{y}, \quad \zeta = z - \bar{z}, \quad (11)$$

при этом новый элемент объёма $d\xi d\eta d\zeta$ совпадает со старым $d\tau = dx dy dz$. Вместо (9) и (10) мы получаем:

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 d\tau; \quad \frac{1}{2} (\Delta x)^2 = \int |\xi \varphi|^2 d\tau. \quad (12)$$

Заметим теперь, что при любом вещественном a справедливо неравенство

$$\left| \frac{\xi}{a} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 \geq 0. \quad (13)$$

В развёрнутом виде это даёт

$$\frac{|\xi \varphi|^2}{a^2} + \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 + \frac{\xi}{a} \left(\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial \xi} \right) = \frac{|\xi \varphi|^2}{a^2} + \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 + \frac{\xi}{a} \frac{\partial |\varphi|^2}{\partial \xi} \geq 0,$$

т. е.

$$\frac{|\xi \varphi|^2}{a^2} + \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi |\varphi|^2}{a} \right) - \frac{|\varphi|^2}{a} \geq 0.$$

Интегрируя, находим:

$$\int \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right|^2 d\tau \geq \frac{1}{a} \int |\varphi|^2 d\tau - \frac{1}{a^2} \int |\xi \varphi|^2 d\tau.$$

Первый интеграл в правой части на основании (8) равен единице; таким образом, из формул (12) следует, что при любом a

$$\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{a} \left(1 - \frac{(\Delta x)^2}{2a} \right). \quad (14)$$

Следовательно, наибольшее значение правой части определяет неизбежный (при данном Δx) минимальный разброс значений импульса. Правая часть (14) имеет максимум при

$$a = (\Delta x)^2, \quad (15)$$

откуда и вытекает соотношение (3).

Осталось ещё показать, что нижняя граница неравенства (\hbar) действительно может достигаться. Это имеет место, если в формулах (3), (13), (14) стоит знак равенства. Тогда на основании (13) и (15) мы получаем:

$$\frac{\xi}{(\Delta x)^2} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} = 0,$$

откуда

$$\varphi = f(\eta, \zeta) e^{-\frac{\xi^2}{2(\Delta x)^2}},$$

или, в силу (8),

$$u = F(y, z) e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar} \bar{p}_x x}. \quad (16)$$

Таким образом, мы возвращаемся к изученному в § 1 волновому пакету и гауссовому закону ошибок. Действительно, наше уравнение (16) идентично (1.3), причём величина Δx соответствует b , произвольная функция $F(y, z)$ — константе C , а $\frac{\bar{p}_x}{\hbar}$, в силу (1.11), совпадает с волновым числом k . Проведённое выше исследование показывает, что для данного волнового пакета величина Δp_x , характеризующая «разброс» значений импульса, определяется из соотношения (3), в котором стоит знак равенства, т. е.

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{\Delta x}. \quad (17)$$

Однако из дальнейшего сравнения с результатами § 1 видно, что в этой наиболее благоприятной форме соотношение неточностей справедливо лишь в один момент времени (который в § 1 можно было принять за начало отсчёта времени $t = 0$). В последующие моменты времени неопределённость (т. е. наше «незнание») координаты будет всё увеличиваться. В самом деле, как видно из рассуждений после формулы (1.12), неопределённость в координате непрерывно возрастает со временем, в то время как неопределённость импульса попрежнему сохраняет свою величину (17).

Рассуждения настоящего параграфа относятся, однако, не только к одной свободной частице, но и к частицам в связанных состояниях, а также к системам многих частиц.

В атомных системах величина $\Delta p_x \cdot \Delta x$ по порядку величины равна площади орбиты, описываемой частицей в фазовой плоскости согласно старой квантовой теории. В этом можно убедиться, выражая площадь орбиты через фазовый интеграл $\int p dq$; таким образом, для квантового числа n получается:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = n\hbar. \quad (18)$$

В данном случае соотношение неопределённостей позволяет сделать некоторые выводы относительно скорости движения частицы по орбите. Именно, на основании (2.4а) мы имеем:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\bar{p}_x}{m}.$$

Для стационарных состояний отсюда следует:

$$(\bar{p}_x)_{nn} = 0. \quad (19)$$

Поэтому [см. (5)] $\frac{1}{2} (\Delta p_x)^2$ сводится к \bar{p}_x^2 . Но в среднем $\bar{p}_x^2 = \frac{1}{3} |\bar{p}|^2$; по этой же причине (по крайней мере, по порядку величины) $\Delta p_x \sim |\bar{p}|$. В результате из (18) следует:

$$\Delta x \cdot |\bar{p}| \approx n\hbar. \quad (20)$$

Следовательно, в стационарных состояниях средний импульс определяется размерами системы в координатном пространстве.

В случае атома водорода мы имеем:

$$\Delta x \approx a_n = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

откуда

$$|\bar{p}| \approx nm \frac{e^2}{\hbar}$$

или иначе

$$\frac{\bar{v}}{c} = \frac{|\bar{p}|}{mc} \approx n \frac{e^2}{\hbar c} = n\alpha, \quad (21)$$

где α — постоянная тонкой структуры. Скорость электрона на первой орбите атома водорода по порядку величины составляет αc (в старой квантовой теории она точно равнялась αc).

Соотношение неопределённостей (3) принадлежит к числу важнейших достижений атомной физики. Оно было установлено в 1927 г. Гейзенбергом¹⁾,

¹⁾ W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 43, 172 (1927).

доказавшим также, что это соотношение имеет силу не только для пары x, p_x , но и для любых канонически сопряжённых величин¹⁾. Особая ценность соотношения неопределённостей состоит в том, что оно, как было подробно показано Гейзенбергом в его книге²⁾, снимает противоречия, возникающие в связи с двойственной природой вещества и света.

Мы ограничимся здесь только рассмотрением одного примера — измерения координаты частицы с помощью диафрагмы (рис. 15). Перед прохождением через щель импульс частицы направлен по оси x и точно известен:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (22)$$

(λ — длина волны де Бройля). При этом координата частицы является совершенно неопределённой: слева от экрана мы имеем бесконечно протяжённую плоскую волну. После прохождения через щель координата частицы известна с точностью до ширины щели d . Соответственно импульс уже не может быть направлен точно по оси x — появляется ещё направленная параллельно экрану составляющая p_y . На волновом языке это означает дифракцию де-бройлевской волны на краю щели; первый дифракционный минимум находится под углом α (см. рис. 15), соответствующим взаимному ослаблению лучей благодаря интерференции:

$$d \sin \alpha = \frac{\lambda}{2}. \quad (23)$$

На корпускулярном языке это означает появление составляющей импульса вдоль оси y :

$$p_y = p \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \sin \alpha. \quad (24)$$

Поскольку $\Delta y = d$, $\Delta p_y = 2p_y$, из (23) и (24) следует:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y = 2d \frac{h}{\lambda} \sin \alpha = h. \quad (25)$$

Это согласуется с соотношением неопределённостей (3).

§ 7. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Мы научились толковать волновую функцию $u(q)$ как амплитуду вероятности того, что в состоянии, характеризуемом функцией u , частица находится в точке q . Таким же образом поставим теперь вопрос об определении амплитуды вероятности того, что в данном состоянии u частица обладает импульсом p . Точнее (поскольку в волновой механике импульс является не числом, а оператором), речь идёт об амплитуде вероятности определённого собственного значения оператора p в состоянии u . Пусть π — данное собственное значение, а $v(\pi)$ — соответствующая амплитуда вероятности. Тогда вероятность обнаружить в состоянии u собственное значение импульса

¹⁾ Для переменных A и B , не являющихся канонически сопряжёнными, вместо (3) имеет место более сложное соотношение неопределённостей [H. P. Robertson, Phys. Rev. 46, 794 (1934); E. Schrödinger, Sitzungsber. d. Preuß. Akad., июль 1930], согласно которому ΔB может иметь конечную величину даже, когда $\Delta A = 0$.

²⁾ В. Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, ГТИИ, 1932.

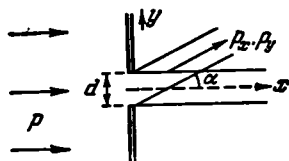


Рис. 15. Диффракция электронной волны как следствие соотношения неопределённостей.

в интервале от π до $\pi + d\pi$ будет

$$|v(\pi)|^2 d\pi.$$

Чтобы вычислить $v(\pi)$, надо знать собственную функцию $S(q)$ оператора импульса при заданном собственном значении последнего. Поскольку

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q},$$

$S(q)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial S}{\partial q} = \pi S, \quad (1)$$

откуда

$$S = S_\pi(q) = S_0 e^{\frac{i}{\hbar} \pi q} = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{\hbar} \pi q} \quad (2)$$

(постоянная интегрирования S_0 выбрана в соответствии с определённым условием нормировки, которое сейчас будет обосновано).

Разложим теперь волновую функцию $u(q)$ по собственным функциям оператора импульса. В силу специального вида (2) это означает не что иное, как переход к интегральному представлению Фурье, которое мы здесь изобразим в виде двух уравнений:

$$\left. \begin{aligned} u(q) &= \frac{1}{\sqrt{h}} \int e^{\frac{i}{\hbar} q \pi} v(\pi) d\pi, \\ v(\pi) &= \frac{1}{\sqrt{h}} \int e^{-\frac{i}{\hbar} q' \pi} u(q') dq'. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Подставляя $v(\pi)$ из второго уравнения (3) в первое, мы придём к привычному виду двойного интеграла Фурье. Сравнение формул (2) и (3) доказывает целесообразность принятой в (2) нормировки ($S_0 = \frac{i}{\sqrt{h}}$). Именно, формулы (3) можно переписать в ещё более наглядной форме следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} u(q) &= \int S_\pi(q) v(\pi) d\pi, \\ v(\pi) &= \int S_q(\pi) u(q) dq, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где в соответствии с (2) и (3)

$$S_q(\pi) = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{-\frac{i}{\hbar} q \pi} = S_\pi^*(q). \quad (5)$$

Эти соотношения мы истолковываем следующим образом: полная амплитуда вероятности обнаружить в состоянии u данное значение координаты q [первая из формул (4)] складывается из амплитуд, соответствующих заданным собственным значениям импульса (собственные функции $S_\pi(q)$); каждая из последних входит с коэффициентом, характеризующим амплитуду вероятности обнаружить в состоянии u данное собственное значение импульса π . Таким образом, мы видим, что величины $v(\pi)$ — коэффициенты Фурье волновой функции — следует отождествить с введёнными в начале настоящего параграфа (и также точно обозначенными) амплитудами вероятности импульса в состоянии u . С другой стороны, полная амплитуда вероятности обнаружить

в состоянии u данное собственное значение импульса [вторая из формул (4)] складывается из амплитуд $S_q(\pi)$, соответствующих заданным координатам q ; каждая из функций $S_q(\pi)$ входит с коэффициентом, характеризующим амплитуду вероятности $u(q)$ обнаружить в состоянии u данное значение координаты. При этом из разложения Фурье видно, что $S_q(\pi)$ комплексно сопряжена с собственной функцией $S_q^*(q)$.

Положение вещей здесь похоже на то, что мы имеем в элементарных задачах теории вероятностей. Пусть A и B — две величины, которые могут принимать значения a_i и b_i . Условную вероятность того, что A примет значение a , если B имеет значение b , обозначим через $W_b(a)$; аналогично условная вероятность того, что B примет значение b , если A равно a , пусть будет $W_a(b)$. Обозначим далее через $w(a)$ и $w(b)$ полные вероятности обнаружить соответственно значение a величины A и значение b величины B . Тогда, как известно,

$$\left. \begin{aligned} w(a) &= \sum_i W_{b_i}(a) w(b_i), \\ w(b) &= \sum_i W_{a_i}(b) w(a_i). \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Эти формулы имеют внешне ту же структуру, что и соотношения (4) (с точностью до несущественной замены интеграла суммой); однако между ними есть характерное различие: в элементарной теории вероятностей складываются вещественные и положительные вероятности, в волновой же механике — комплексные амплитуды вероятности. Последние могут *интерферировать* (взаимно уничтожая друг друга), первые же — не могут. Если в волновой механике от амплитуд перейти к самим вероятностям, образовав вместо $u(q)$ выражения $|u(q)|^2$, то для них простые соотношения типа (6) отнюдь не будут справедливы.

Распространим теперь наши рассуждения на случай произвольного оператора $L(q, p)$. Уравнение для определения его собственных значений аналогично (1) имеет вид:

$$L\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right) S = \lambda S. \quad (7)$$

Решение этого уравнения обозначим через $S_\lambda(q)$; в отличие от (2) оно зависит уже не только от произведения λq . Рассматривая систему собственных функций $S_\lambda(q)$ как полную, допустим, что волновую функцию $u(q)$, на которую действует оператор L , можно разложить по $S_\lambda(q)$.

Напишем это разложение в интегральной форме — по образцу первой из формул (4):

$$u(q) = \int S_\lambda(q) v(\lambda) d\lambda \quad (8)$$

(следует только иметь в виду, что, вообще говоря, оператор L может обладать и дискретным спектром, и тогда к интегралу добавляется сумма). Функцию $v(\lambda)$ можно назвать коэффициентом разложения u по S . Если функции S ортогональны и нормированы к единице, она вычисляется так же, как и в случае интеграла Фурье:

$$v(\lambda) = \int S_\lambda^*(q) u(q) dq. \quad (9)$$

Определяя по аналогии с (5) функцию

$$S_q(\lambda) = S_\lambda^*(q),$$

мы можем написать:

$$v(\lambda) = \int S_q(\lambda) u(q) dq. \quad (9a)$$

Функция $v(\lambda)$ представляет собой амплитуду вероятности обнаружить в состоянии u собственное значение λ оператора L , а $S_\lambda(q)$ есть амплитуда вероятности того, что при заданном λ частица попадает в точку q . Единственное отличие от специального случая оператора импульса состоит в том, что собственная функция S теперь не представляет плоской волны и в явном виде неизвестна; поэтому вместо разложения в интеграл Фурье мы имеем дело, в зависимости от природы оператора L , с общей формой разложения по собственным функциям.

С истолкованием $v(\lambda)$ как амплитуды вероятности оператора L связан рассмотренный ранее вопрос о среднем значении \bar{L} этого оператора. Если $v(\lambda)$ — амплитуда вероятности, то функция

$$\rho = |v(\lambda)|^2 \quad (10)$$

определяет вероятность того, что собственное значение λ лежит в пределах от λ до $\lambda + d\lambda$. Соответственно среднее значение L должно иметь вид суммы по всем значениям λ с весовой функцией ρ :

$$\bar{L} = \int \rho \lambda d\lambda = \int v(\lambda) \lambda v^*(\lambda) d\lambda. \quad (11)$$

Мы покажем, что это определение совпадает с общим правилом вычисления волномеханических средних значений (2.14). Ограничиваясь одномерным случаем, последнее можно записать в виде

$$\bar{L} = \int u^*(q) L\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right) u(q) dq. \quad (12)$$

Подставим вместо $u(q)$ разложение (8) и воспользуемся (7). Тогда формула (12) принимает вид:

$$\bar{L} = \int dq u^*(q) \int d\lambda \cdot \lambda S_\lambda(q) v(\lambda) = \int d\lambda v(\lambda) \lambda \int dq u^*(q) S_\lambda(q). \quad (13)$$

Последний из написанных здесь интегралов в силу (9) равен $v^*(\lambda)$; таким образом, представление (12) действительно совпадает с (11).

Поясним это обстоятельство на примере. В качестве L выберем оператор момента количества движения:

$$L = M_\phi. \quad (14)$$

Применим его к волновой функции u , описывающей состояние одной частицы в центрально-симметричном поле, характеризуя состояние собственными значениями операторов M_z и M^2 :

$$u = \dots N P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (15)$$

Многоточие означает здесь радиальную часть волновой функции, не представляющую для нас интереса; множитель N нормирует функцию от углов к единице. Соотношения (3.36)—(3.38) дают нам связь между операторами M_z , M^2 , с одной стороны, и квантовыми числами m и l — с другой (имея здесь дело с одноэлектронной проблемой, мы пишем m , l вместо фигурировавших в § 3 M и L). Мы имеем:

$$M_z u = \hbar m u, \quad M^2 u = \hbar^2 l(l+1) u. \quad (16)$$

В противоположность M_z величина M_ω в состоянии (15) отнюдь не является точно определённой, а может принимать, вообще говоря, различные значения. Мы ставим себе задачей вычислить вероятности обнаружения различных значений M_ω при измерении.

Помимо полярных углов θ, φ , связанных с осью z , удобно ввести ещё другую систему координат, в которой за полярную ось принята ось x ; соответствующие углы обозначим через Θ, Φ . Связь между первой и второй системами даётся формулами:

$$\left. \begin{aligned} \frac{x}{r} &= \cos \Theta = \sin \theta \cos \varphi, \\ \frac{y}{r} &= \sin \Theta \cos \Phi = \sin \theta \sin \varphi, \\ \frac{z}{r} &= \sin \Theta \sin \Phi = \cos \theta. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

В координатах Θ, Φ оператор M_ω имеет такой же удобный вид, как M_z в координатах θ, φ . Так на основании (3.36) мы имеем:

$$M_z S = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial S}{\partial \varphi} = \hbar m S, \quad S = S_0 e^{im\varphi} \quad (18)$$

(S — собственная функция оператора M_z в координатах θ, φ , принадлежащая собственному значению $m\hbar$).

Соответственно для M_ω можно написать:

$$M_\omega S = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial S}{\partial \Phi} = \hbar \mu S, \quad S = S_0 e^{i\mu\Phi} \quad (19)$$

(S — собственная функция оператора M_ω в координатах Θ, Φ , принадлежащая собственному значению $\hbar\mu$). Как и m, μ должно быть целым числом, чтобы обеспечить однозначность функции $S(\Phi)$. В формуле (19) остаётся ещё неопределённой функция S_0 . Поскольку мы собираемся различать μ по собственным функциям уравнения (19), они должны образовывать полную систему [см. замечания перед соотношением (8)]. Для конструирования последней удобно, помимо M_ω , рассмотреть ещё оператор M^2 в координатах Θ, Φ , задав его собственное значение тем же квантовым числом l , которое фигурирует и в (16). Тогда мы получаем подобно (15):

$$S = \dots N P_l^\mu(\cos \Theta) e^{i\mu\Phi} \quad (20)$$

и, сравнивая (20) с (19), находим:

$$S_0 = N P_l^\mu(\cos \Theta). \quad (21)$$

Нормировочный множитель N определяется условием

$$\int |S|^2 d\Omega = N^2 \int [P_l^\mu(\cos \Theta)]^2 d\Omega = 1, \quad d\Omega = \sin \Theta d\Theta d\Phi. \quad (22)$$

Тот же множитель с заменой μ на m будет фигурировать и в (15). Возвратимся теперь к формулам (8), (9). Поскольку в данном случае μ пробегает лишь дискретный набор значений (целые числа), интегрирование по λ в (8) следует заменить суммированием по μ . Соответственно вместо (8) и

(9) мы получаем:

$$N_m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} = \sum_{\mu} N_{\mu} P_l^{\mu}(\cos \theta) e^{i\mu\Phi} \vartheta(\mu), \quad (23)$$

$$\vartheta(\mu) = \int N_{\mu} P_l^{\mu}(\cos \theta) e^{-i\mu\Phi} N_m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} d\omega, \quad (24)$$

где $d\omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ (вместо $d\omega$ можно написать и $d\Omega = \sin \Theta d\Theta d\Phi$).

Рассмотрим простейшие случаи.

а) $l=0$ (s -терм). Следовательно, $m=0$, $\mu=0$. Из (22) получаем $N_m = N_{\mu} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Формулы (23) и (24) сводятся к равенству $\vartheta(0) = 1$. Это

означает, что, измеряя M_{ω} , мы с достоверностью получим нуль, что для s -терма очевидно. Этот случай, однако, замечателен в том отношении, что операторы M_{ω} и M_z не перестановочны и, следовательно, вообще говоря, не должны одновременно иметь точно определённые значения. Мы видим, что в некоторых специальных случаях это всё же возможно.

б) $l=1$, $m=0$. Поскольку функция P_l^{μ} должна быть непрерывной, μ может принимать только значения $\pm 1, 0$. Из (22) получаем:

$$N_{m=0} = N_{\mu=0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}, \quad N_{\mu=\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}.$$

Формула (24) теперь даёт:

$$\vartheta(0) = \frac{3}{4\pi} \int \cos \Theta \cos \vartheta d\omega,$$

откуда, подставляя $\cos \Theta$ из первого из уравнений (17), находим:

$$\vartheta(0) = 0.$$

Далее, формула (24) даёт:

$$\vartheta(\pm 1) = \frac{3}{4\pi \sqrt{2}} \int \sin \Theta \cos \vartheta e^{\mp i\Phi} d\omega.$$

Функцию $\sin \Theta e^{\mp i\Phi}$ можно выразить в переменных ϑ , φ , воспользовавшись двумя последними уравнениями (17). Мы получаем:

$$\vartheta(\pm 1) = \frac{\mp 3i}{4\pi \sqrt{2}} \int \cos^2 \vartheta d\omega = \frac{\mp i}{\sqrt{2}}.$$

В сумме мы имеем:

$$|\vartheta(1)|^2 + |\vartheta(0)|^2 + |\vartheta(-1)|^2 = \frac{1}{2} + 0 + \frac{1}{2} = 1.$$

Таким образом, при измерении M_{ω} значения $\mu=1$ и $\mu=-1$ обнаруживаются с равной вероятностью; значение $\mu=0$ вообще не может быть получено.

Этот же результат можно было бы проще получить из формулы (23). Левая часть её в случае (б) имеет вид [с учётом последнего из уравнений (17)]:

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \Theta \frac{1}{2i} (e^{i\Phi} - e^{-i\Phi}).$$

Правую часть (23) запишем в виде:

$$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \Theta [e^{i\Phi} \vartheta(+1) + e^{-i\Phi} \vartheta(-1)] + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta \vartheta(0).$$

Сравнивая эти два соотношения, находим:

$$v(+1) = -i \sqrt{\frac{1}{2}} = -v(-1); \quad v(0) = 0.$$

в) $l = 1, m = \pm 1$. Для краткости воспользуемся формулой (23). Левую часть её, учитывая первые два уравнения (17), можно записать в виде:

$$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\cos \theta \pm \frac{i}{2} \sin \theta (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right].$$

Правая часть запишется так:

$$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta [e^{i\theta} v(1) + e^{-i\theta} v(-1)] + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta v(0).$$

Отсюда

$$v(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad v(1) = v(-1) = \pm \frac{i}{2}.$$

В 50% всех измерений следует ожидать значения $M_m = 0$; по 25% приходится на $M_m = +1$ и $M_m = -1$.

Сведём все результаты исследования случаев а), б), в) в таблицу; добавив в неё также и то, что получается при $l = 2$ [значения μ , при которых $v(\mu) = 0$, в таблице опущены].

l	0	1	1	2	2	2
m	0	0	1	0	1	2
μ	0	+1 -1	1 0 -1	2 0 -2	2 1 -1 -2	2 1 0 -1 -2
$ v(\mu) ^2$	1	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}$	$\frac{3}{8}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{16}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{3}{8}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{16}$

В первоначальной формулировке волновой механики из всех возможных способов описания состояния системы предпочитался *координатный*. Соответственно из дифференциального уравнения (и граничных условий) определялась *вероятность* того или иного *положения* частицы. *Теория представлений* пытается устранить эту односторонность, ставя вопрос о *вероятности* тех или иных значений *любой механической величины* (любого оператора). В предшествовавшем изложении эта общая программа ещё не была проведена полностью, так как зависимость от координат играла всё же особую роль: при вычислениях $v(\lambda)$ мы исходили из волновой функции $u(q)$ и пользовались собственной функцией $S_\lambda(q)$, представленной как функция координат q .

В противоположность этому мы рассмотрим теперь взаимосвязь между двумя операторами (например, M_x и M_y), не обращаясь к координатам q (например, к углам θ, φ). Обозначим наши операторы буквами L и M , их собственные значения пусть будут Δ и M . Чтобы установить связь с предыдущим изложением, найдём прежде всего собственные функции в зависимости от q :

$$S_\Delta(q), \quad S_M(q)$$

и выпишем для обоих операторов формулы (8) и (9):

$$\left. \begin{aligned} u(q) &= \int S_{\Delta}(q) v(\Delta) d\Delta, & v(\Delta) &= \int S_q(\Delta) u(q) dq; \\ u(q) &= \int S_M(q) \varpi(M) dM, & \varpi(M) &= \int S_q(M) u(q) dq. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Комбинируя последнее из этих соотношений с первым, находим:

$$\varpi(M) = \int \int S_q(M) S_{\Delta}(q) dq v(\Delta) d\Delta. \quad (26)$$

Чтобы и формально исключить переменную q , введём для интеграла по q новое обозначение. Обобщая наш прежний способ обозначений, естественно положить:

$$S_{\Delta}(M) = \int S_q(M) S_{\Delta}(q) dq. \quad (27)$$

Тогда (26) принимает вид:

$$\varpi(M) = \int S_{\Delta}(M) v(\Delta) d\Delta. \quad (28)$$

Это наиболее общее соотношение теории представлений. Оно непосредственно связывает вероятности значений M с величинами Δ без явного обращения к координатам.

ГЛАВА IV

ТЕОРИЯ ДИРАКА

§ 1. РЕЛЯТИВИСТСКОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В настоящее время от любой физической теории следует требовать, чтобы она удовлетворяла *принципу относительности*. В нашем случае под этим следует понимать требование инвариантности относительно преобразований Лоренца, так как силы тяготения не играют роли в атомных явлениях. Рассматривая релятивистское обобщение волновой механики, мы ограничимся только одноэлектронной задачей, ибо релятивистская трактовка многоэлектронной проблемы представляет ещё не разрешённые трудности.

Будем поступать так же, как и в § 6 гл. I, с той лишь разницей, что вместо формул классической механики воспользуемся релятивистскими выражениями.

А. Силы обладают потенциалом, не зависящим от времени. Выражение для энергии запишем в виде:

$$H = mc^2 + V = E. \quad (1)$$

Здесь mc^2 содержит не только кинетическую энергию частиц, но ещё и энергию покоя

$$E_0 = m_0c^2. \quad (1a)$$

Величина E представляет собой полную энергию (в смысле примечания на стр. 9):

$$E = E_0 + W. \quad (1b)$$

Как обычно, V нормируется так, чтобы на бесконечности $V = 0$. Возводя (1) в квадрат, получаем:

$$m^2c^4 = \frac{m_0^2c^4}{1-\beta^2} = (E - V)^2. \quad (2)$$

Но

$$\frac{m_0^2c^4}{1-\beta^2} = m_0^2c^4 \left(\frac{\beta^2}{1-\beta^2} + 1 \right) = c^2p^2 + E_0^2, \quad (3)$$

где p — релятивистский импульс частицы:

$$p = m\mathbf{v} = \frac{m_0c}{\sqrt{1-\beta^2}} \boldsymbol{\beta}. \quad (3a)$$

Таким образом, на основании (3) формула (2) превращается в хорошо известное релятивистское выражение для энергии:

$$c^2p^2 = (E - V)^2 - E_0^2. \quad (4)$$

Чтобы перейти к волновой механике, следует в соответствии с формулой (6.2) гл. I заменить импульс p на

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (q = x, y, z) \quad (5)$$

и, рассматривая преобразованное таким образом выражение (4) как оператор, применить его к волновой функции ψ . Мы получаем тогда:

$$\hbar^2 c^2 \Delta \psi + \{(E - V)^2 - E_0^2\} \psi = 0. \quad (6)$$

Б. Присутствуют не зависящие от времени силы магнитного происхождения (не имеющие потенциала); энергия системы сохраняется. В данном случае надлежит различать импульс в элементарном смысле ($m\mathbf{v}$) и импульс p , канонически сопряжённый с координатой q . Как показано в дополнении 3 (формулы (3) и (13)), первый связан с последним следующим образом:

$$m\mathbf{v} = p - \frac{e}{c} A. \quad (7)$$

В уравнении (3а) вектор p имел смысл элементарного импульса; поэтому в уравнении (4) следует заменить p на $p - \frac{e}{c} A$. Мы получаем, таким образом,

$$c^2 \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 = (E - V)^2 - E_0^2. \quad (8)$$

В волновой механике оператором (5) заменяется именно канонический импульс p ; следовательно, согласно (8), волновое уравнение имеет вид:

$$\hbar^2 c^2 \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right)^2 \psi + \{(E - V)^2 - E_0^2\} \psi = 0, \quad (9)$$

что, пользуясь обычными векторными обозначениями, можно переписать в виде ¹⁾:

$$\hbar^2 c^2 \Delta \psi - 2ie\hbar c (A, \text{grad } \psi) + \{(E - V)^2 - E_0^2 - e^2 A^2\} \psi = 0. \quad (9a)$$

В. Силы не имеют потенциала и, вообще говоря, зависят от времени. Энергия системы не сохраняется. Как было разъяснено в гл. I, § 6 [формулы (7) и (8)], в этом случае надлежит исходить из операторного уравнения:

$$H + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} = 0.$$

Подставляя в соответствии с (1) вместо H выражение $mc^2 + V$, мы получаем:

$$mc^2 = - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + V \right),$$

или, возводя это в квадрат:

$$m^2 c^4 = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + V \right)^2. \quad (10)$$

Значение $m^2 c^4$ даётся формулами (2) и (3), в которых попрежнему элементарный импульс следует заменить на $p - \frac{e}{c} A$, а вместо p подставить (5).

¹⁾ При выполнении (9) появляется ещё член с множителем $\text{div } A \psi$.

Таким образом, уравнение (10) принимает вид:

$$\hbar^2 c^2 \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{ie}{\hbar c} A_k \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + V \right)^2 - E_0^2 = 0. \quad (11)$$

Четырёхмерная симметрия этого оператора выявится, если ввести четырёхмерные векторы координат (x_α) и потенциала (Φ_α) ($\alpha = 1, 2, 3, 4$). Пусть, как обычно:

$$x_4 = ict; \quad \Phi_4 = i\varphi = i\frac{V}{c}, \quad \text{т. е.} \quad V = -ie\Phi_4; \quad (11a)$$

$$x_{1, 2, 3} = q_{1, 2, 3}; \quad \Phi_{1, 2, 3} = A_{1, 2, 3}. \quad (11b)$$

Тогда левая часть (11) (мы будем обозначать её через L) принимает симметричный вид:

$$L = \hbar^2 c^2 \sum_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right)^2 - E_0^2. \quad (12)$$

Оператор L следует применить к волновой функции u (которая теперь зависит от времени). При этом и получается релятивистское уравнение Шредингера:

$$Lu = \left\{ \hbar^2 c^2 \sum_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right)^2 - E_0^2 \right\} u = 0, \quad (13)$$

инвариантность которого относительно преобразований Лоренца непосредственно очевидна.

Частные случаи (6) и (9) получаются из (13), если положить

$$u = \psi e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Раскрывая скобки в (13) и деля все уравнение на $\hbar^2 c^2$, находим:

$$\square u - \frac{2ie}{\hbar c} (\Phi, \text{Grad } u) - \frac{e^2 \Phi^2 + E_0^2}{\hbar^2 c^2} u = 0, \quad (13a)$$

где, как обычно,

$$\left. \begin{aligned} \square &= \sum \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}; & \Phi^2 &= \sum \Phi_\alpha^2, \\ (\Phi, \text{Grad } u) &= \sum \Phi_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha}, \end{aligned} \right\} \quad (13b)$$

и наложено условие

$$\text{Div } \Phi = \sum \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \Phi_\alpha = 0.$$

Релятивистское обобщение волнового уравнения (13) было дано Шредингером в конце его четвёртого сообщения и почти одновременно получено рядом других авторов¹⁾.

Вывод волнового уравнения составляет, однако, только первый шаг в построении релятивистской волновой механики. Второй шаг состоит в вычислении плотности тока и заряда, для чего в свою очередь необходимо написать сопряжённое волновое уравнение.

¹⁾ O. Klein, *Zs. f. Phys.* **37**, 895 (1926); В. А. Фок, *Zs. f. Phys.* **38**, 242 (1926); **39**, 226 (1926); J. Kudar, *Ann. d. Phys.* **81**, 632 (1926); W. Gordon, *Zs. f. Phys.* **40**, 117 (1926); Th. de Donder u. H. van de Dungen, *C. R.*, июль 1926.

Мы утверждаем, что сопряжённый с L оператор M получится, если в (12) изменить знак у i , т. е.¹⁾

$$M = \hbar^2 c^2 \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right)^2 - E_0^2. \quad (14)$$

Для доказательства следует воспользоваться уравнением (1) из § 7 гл. 1, которое можно рассматривать как определение M :

$$vL(u) - uM(v) = \text{Div } S = \sum_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}}. \quad (15)$$

Надо показать, что уравнение (15) действительно удовлетворяется, если M имеет вид (14). При этом удобно исходить из выражения (13а) для L и соответственно писать M в виде:

$$M(v) = \square v + \frac{2ie}{\hbar c} (\Phi, \text{Grad } v) - \frac{e^2 \Phi^2 + E_0^2}{\hbar^2 c^2} v. \quad (15a)$$

Объединяя члены с $\square u$ и $\square v$, мы получаем, очевидно,

$$v \frac{\partial^2 u}{\partial x_{\alpha}^2} - u \frac{\partial^2 v}{\partial x_{\alpha}^2} = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(v \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} - u \frac{\partial v}{\partial x_{\alpha}} \right). \quad (16)$$

С другой стороны, объединяя вторые слагаемые с (13а) и (15а), находим:

$$-\frac{2ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \left(v \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} + u \frac{\partial v}{\partial x_{\alpha}} \right) = -\frac{2ie}{\hbar c} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (\Phi_{\alpha} uv) - uv \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} \right\}. \quad (16a)$$

Члены с $\frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}}$ можно отбросить, так как при суммировании по α они всё равно дадут нуль в силу (13б).

Наконец, последние слагаемые в (13а) и (15а), очевидно, ничего не вносят в (15).

В результате мы получаем с помощью формул (16) и (16а):

$$vL(u) - uM(v) = \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(v \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} - u \frac{\partial v}{\partial x_{\alpha}} - \frac{2ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} uv \right). \quad (17)$$

Таким образом, справедливость уравнения (15) доказана. Одновременно мы вычислили в явном виде и фигурирующий там четырёхмерный вектор S^{α} :

$$S_{\alpha} = v \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} - u \frac{\partial v}{\partial x_{\alpha}} - \frac{2ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} uv. \quad (18)$$

Если, в частности, u и v удовлетворяют уравнениям $L(u) = 0$ и $M(v) = 0$, то имеет место уравнение непрерывности:

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0. \quad (19)$$

¹⁾ Поскольку величины x_4 и Φ_4 сами являются мнимыми, член с $\alpha = 4$ будет сначала входить с отрицательным знаком, который, однако, пропадёт при возведении в квадрат.

²⁾ Естественно, к выражению (18) можно добавить ещё любой четырёхмерный вектор с равной нулю дивергенцией (типа четырёхмерного ротора). В дальнейшем, однако, мы можем отвлечься от этого обстоятельства.

Это даёт нам право рассматривать первые три компоненты S как ток, а четвёртую — как плотность. Именно, в соответствии с уравнением (6а) (стр. 47) мы полагаем:

$$S = \frac{2im_0}{h} (j, ic\rho). \quad (20)$$

Так же как и S , $(j, ic\rho)$ представляет собой четырёхмерный вектор. Из условия (19) следует, что величины j и ρ удовлетворяют уравнению непрерывности в известной из гидродинамики форме:

$$\operatorname{div} j + \frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (21)$$

Чтобы оправдать введённый в (20) множитель пропорциональности, вычислим с помощью формулы (18) величину S_4 . Принимая во внимание (11а), находим:

$$S_4 = \frac{1}{ic} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) + \frac{2V}{hc} uv. \quad (22)$$

Пусть функции u и v описывают стационарные состояния с одной и той же энергией E :

$$u = \psi e^{-\frac{i}{h} Et}, \quad v = \psi^* e^{+\frac{i}{h} Et}.$$

Тогда (22) принимает вид:

$$S_4 = -\frac{2}{hc} (E - V) \psi \psi^* = -\frac{2E_0}{hc} \frac{E - V}{E_0} \psi \psi^*. \quad (22a)$$

Совершим теперь предельный переход

$$c \rightarrow \infty, \quad \text{т. е.} \quad E_0 \rightarrow \infty, \quad \frac{E - V}{E_0} \rightarrow 1$$

к нерелятивистской волновой механике, в которой, по определению, плотность $\rho = \psi \psi^*$. Тогда из (22а) мы получаем:

$$S_4 \rightarrow -\frac{2m_0}{h} c\rho,$$

что, очевидно, согласуется с избранным в (20) множителем при ρ . Сравнивая теперь (22а) и (20), находим непосредственно:

$$\rho = \frac{E - V}{E_0} \psi \psi^*. \quad (23)$$

Однако этот результат несовместим со статистическими основами волновой механики. Рассмотрим, например, кулоновский потенциал (в случае сил отталкивания):

$$V = \frac{a}{r},$$

a — произвольная положительная величина. Вблизи точки $r = 0$ разность $E - V$, а вместе с ней и плотность ρ , обязательно станет отрицательной, что противоречит статистическому истолкованию ρ как плотности вероятности координат частицы.

Итак, мы приходим к выводу, что рассмотренное здесь непосредственное релятивистское обобщение волнового уравнения, хотя и возможное математически, физически является недопустимым.

Однако этот аргумент, впервые выдвинутый Дираком и затем принятый всеми, недавно был в известном смысле опровергнут Паули и Вейскопфом¹⁾. Названные авторы интерпретируют выражение (23) (умноженное на e) не как *плотность числа частиц*, а как *плотность заряда*. Последняя же вполне может менять знак, так как релятивистское уравнение Шредингера (равно как и уравнение Дирака) описывает, в частности, и процессы «образования пар» (см. § 10 настоящей главы). С другой стороны; согласно Паули и Вейскопфу, представление о плотности числа частиц благодаря возможности образования пар вообще не имеет ясного смысла. Однако и отвлекаясь от рассмотренных осложнений, мы всё же должны признать релятивистское уравнение Шредингера физически недостаточным.

Чтобы убедиться в этом, рассмотрим задачу Кеплера. Здесь выполняются условия пункта А и поэтому справедливо простое уравнение (6) (причём $V = -\frac{Ze^2}{r}$). Запишем его в виде:

$$\Delta\psi + \left(A + 2\frac{B}{r} + \frac{C'}{r^2} \right) \psi = 0, \quad (24)$$

где введены следующие сокращённые обозначения:

$$A = \frac{E^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2}, \quad B = \frac{Ze^2 E}{\hbar^2 c^2}, \quad C' = \frac{Ze^4}{\hbar^2 c^2}. \quad (25)$$

Уравнение (24) имеет почти такой же вид, как и в нерелятивистском случае (см. гл. II), и, как и там, имеет решение вида

$$\psi = RP_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}.$$

Функция R удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(A + 2\frac{B}{r} + \frac{C'}{r^2} \right) R &= 0, \\ C = C' - l(l+1) &= \alpha^2 Z^2 - l(l+1), \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

где α — постоянная тонкой структуры.

Мы не будем подробно останавливаться на определении собственных функций, а непосредственно перейдём к вычислению собственных значений с помощью удобного метода, изложенного в дополнении 2. Для этой цели введём новые переменные:

$$R = e^{-\rho/2} v; \quad \rho = 2\sqrt{-A} r$$

[см. совершенно аналогичные вычисления на стр. 71, формулы (4а)—(7)]. Мы получаем (штрих означает дифференцирование по ρ):

$$\rho^2 v'' + \rho(2 + \rho) v' + \left\{ \left(\frac{B}{\sqrt{-A}} - 1 \right) \rho + C \right\} v = 0. \quad (27)$$

Сравнивая (27) с формулой (9) дополнения 2, находим для фигурирующих в (9) констант:

$$\left. \begin{aligned} A_2 &= 1, \quad B_2 = 0, \quad A_1 = 2, \quad B_1 = -1, \\ A_0 &= C, \quad B_0 = \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

¹⁾ W. Pauli u. V. Weisskopf, Heiv. Phys. Acta 7, 709 (1935).

На основании формулы (10) дополнения 2 характеристическое уравнение, определяющее поведение функции ψ при $r \rightarrow 0$, имеет вид (мы обозначаем показатель степени r через γ , так как буква α теперь означает постоянную тонкой структуры):

$$\gamma(\gamma - 1) + 2\gamma = l(l + 1) - \alpha^2 Z^2,$$

откуда

$$\left. \begin{aligned} \left(\gamma + \frac{1}{2}\right)^2 &= \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2, \\ \gamma &= \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2} - \frac{1}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Наконец, условие обрыва степенного ряда на основании (28) и формулы (12) приложения 2 записывается в виде (мы пишем n_r вместо n):

$$\gamma + n_r = \frac{B}{\sqrt{-A}} - 1,$$

т. е., в силу (29),

$$\frac{B}{\sqrt{-A}} = n_r + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2} + \frac{1}{2}. \quad (30)$$

Но вследствие (25)

$$-\frac{B^2}{A} = -\alpha^2 Z^2 \frac{E^2}{E^2 - E_0^2}. \quad (31)$$

Полагая временно

$$\beta = \frac{B}{\sqrt{-A}}, \quad (32)$$

получаем из (31):

$$\left. \begin{aligned} \frac{E^2 - E_0^2}{E^2} &= -\frac{\alpha^2 Z^2}{\beta^2}, \\ \frac{E_0^2}{E^2} &= 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\beta^2}. \end{aligned} \right\} \quad (32a)$$

Возводя последнее уравнение в степень $-1/2$ и подставляя значение β , находим:

$$\frac{E}{E_0} = 1 + \frac{W}{m_0 c^2} = \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left[n_r + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2} + \frac{1}{2} \right]^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (33)$$

Эта формула имеет общую конструкцию *формулы тонкой структуры*, выведенной в первом томе. Имеется, однако, одно существенное отличие: вместо фигурировавшего ранее числа $n_0^2 = (l + 1)^2$ теперь под знаком корня стоит $(l + 1/2)^2$, что до некоторой степени компенсируется добавочным слагаемым $1/2$. Этого слагаемого достаточно, чтобы получить правильную нерелятивистскую формулу Бальмера; в самом деле, разлагая правую часть (33) в ряд по степеням α^2 , в первом приближении находим:

$$W = -\frac{1}{2} \frac{m_0 c^2 \alpha^2 Z^2}{n^2} = -\frac{R h Z^2}{n^2},$$

где

$$n = n_0 + l + 1; \quad R = \frac{1}{2} \frac{m_0 c^4 \alpha^2}{h} = \frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^3}.$$

Однако для *тонкой структуры* формула (33) даёт неправильный результат.

Действительно, во втором приближении получается:

$$W = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right\}, \quad (34)$$

в то время как правильное выражение имеет вид [см. т. I (V. 2. 6a); мы несколько изменяем обозначения в соответствии с принятыми здесь]:

$$W = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) \right\}. \quad (34a)$$

Расстояние между термами, образующими тонкую структуру, даётся разностью (ΔW) значений W , соответствующих двум отличающимся на единицу значениям l . Мы видим, что формула (34) приводит к значительно большему расщеплению термов, чем (34a). Например, при $n=2$, $l=0$ и 1 мы получаем из (34):

$$\Delta \frac{n}{l+1/2} = 2 \left(2 - \frac{2}{3} \right) = \frac{8}{3},$$

в то время как (34a) даёт:

$$\Delta \frac{n}{l+1} = 2 \left(1 - \frac{1}{2} \right) = 1.$$

Таким образом, согласно новому уравнению, расстояние между компонентами водородного дублета должно быть в $8/3$ раза больше, чем получалось по старой, подтверждённой опытом формуле. Аналогично обстоит дело и для более высоких термов ($n=3, 4, \dots$). Тем самым доказывается несостоятельность новой формулы тонкой структуры и, следовательно, релятивистского уравнения Шредингера.

Истинная причина этой неудачи состоит в том, что релятивистское уравнение Шредингера не учитывает *спина* электрона. Поэтому оно применимо лишь для бесспиновых частиц [α -частицы, частицы, подчиняющиеся статистике Бозе]. С другой стороны, теория электронов нуждается в совершенно новых математических и физических средствах.

§ 2. ПЕРЕХОД К УРАВНЕНИЮ ДИРАКА. МАГНИТНЫЙ И МЕХАНИЧЕСКИЙ МОМЕНТЫ ЭЛЕКТРОНА

Гениальная идея Дирака¹⁾ состояла в том, чтобы «линеаризовать» релятивистское уравнение Шредингера. Это можно сделать по аналогии с обычными комплексными числами. Квадратичную величину $a^2 + b^2$ можно расщепить на два линейных множителя, вводя мнимую единицу i :

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib).$$

Аналогичным образом мы преобразуем и релятивистское уравнение Шредингера, вводя «гиперкомплексные единицы» γ . Рассмотрим прежде всего случай *свободного движения* ($\Phi_e = 0$) и напомним вместо (1.13):

$$\left\{ \sum \gamma_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \left\{ \sum \gamma_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0, \quad \alpha = 1, \dots, 4. \quad (1)$$

¹⁾ Первые работы Дирака по теории электронов появились в феврале и марте 1928 г., см. P. A. M. Diraс, Proc. Roy. Soc., февраль и март 1928.

Это уравнение совпадает с (1.13) (при $\Phi_a = 0$), если наложить на величины γ следующие условия:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_a^2 &= 1, \\ \gamma_a \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma_a &= 0 \end{aligned} \right\} \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4; \quad \beta \neq \alpha, \quad (2)$$

или в более сжатом виде:

$$\gamma_a \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma_a = 2\delta_{a\beta}. \quad (2a)$$

Согласно второму из уравнений (2) величины γ *антикоммутируют*:

$$\gamma_a \gamma_\beta = -\gamma_\beta \gamma_a. \quad (2b)$$

Соотношениями (2) величины γ определены с достаточной для наших целей полнотой. Специальное представление γ (четырёхрядными матрицами) нам не потребуется и будет рассмотрено лишь в дополнении 13.

Теперь мы можем заменить (1) *линеаризованным* уравнением

$$\left\{ \sum \gamma_a \frac{\partial}{\partial x_a} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0; \quad (3)$$

выполнение уравнения (3) влечёт за собой как следствие и выполнение (1). Другое линеаризованное уравнение, которое можно получить из (1):

$$\left\{ \sum \gamma_a \frac{\partial}{\partial x_a} - \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0, \quad (3a)$$

равносильно (3), так как условия (2) определяют γ лишь с точностью до знака, а одновременное изменение знака у всех γ переводит (3a) в (3).

Соотношение (3) представляет собой *уравнение Дирака* для электрона в *отсутствии внешних сил*. *Общее уравнение Дирака* в присутствии внешнего электромагнитного поля Φ_a мы получим, если в соответствии с (1.13) напомним:

$$\left\{ \sum \gamma_a \left(\frac{\partial}{\partial x_a} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_a \right) + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0. \quad (4)$$

Однако это уравнение уже не идентично (1.13): решения (4) не удовлетворяют релятивистскому уравнению Шредингера. Напротив, в последнее вносятся радикальные поправки.

Чтобы убедиться в этом, введём удобное для дальнейшего сокращённое обозначение:

$$\Omega_a = \frac{\partial}{\partial x_a} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_a. \quad (5)$$

Тогда уравнение (4) принимает вид:

$$\left\{ \sum \gamma_a \Omega_a + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0. \quad (6)$$

Умножим (6) слева на

$$\sum \gamma_\beta \Omega_\beta - \frac{E_0}{\hbar c},$$

т. е. образуем выражение

$$\left\{ \sum \gamma_\beta \Omega_\beta - \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \left\{ \sum \gamma_a \Omega_a + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} u = 0,$$

или, что то же самое,

$$\left\{ \sum \gamma_\beta \Omega_\beta \sum \gamma_a \Omega_a - \frac{E_0^2}{\hbar^2 c^2} \right\} u = 0. \quad (6a)$$

Чтобы преобразовать двойную сумму по α и β , рассмотрим, во-первых, два члена с одинаковыми индексами суммирования ($\beta = \alpha$)

$$\gamma_\alpha \Omega_\alpha \cdot \gamma_\alpha \Omega_\alpha \quad (7)$$

и, во-вторых, объединим попарно слагаемые с разными индексами суммирования ($\beta \neq \alpha$):

$$\gamma_\beta \Omega_\beta \gamma_\alpha \Omega_\alpha + \gamma_\alpha \Omega_\alpha \gamma_\beta \Omega_\beta. \quad (7a)$$

Величины γ , будучи постоянными, перестановочны с Ω . Поэтому вместо (7) можно написать [учитывая (2)]:

$$\gamma_\alpha \gamma_\alpha \Omega_\alpha \Omega_\alpha = \Omega_\alpha^2. \quad (8)$$

По той же причине (7a) можно переписать в виде:

$$\gamma_\beta \gamma_\alpha \Omega_\beta \Omega_\alpha + \gamma_\alpha \gamma_\beta \Omega_\alpha \Omega_\beta = \gamma_\alpha \gamma_\beta (\Omega_\alpha \Omega_\beta - \Omega_\beta \Omega_\alpha). \quad (8a)$$

Но в силу (5):

$$\begin{aligned} \Omega_\alpha \Omega_\beta u &= \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\beta \right) u = \\ &= \frac{\partial^2 u}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} - \frac{ie}{\hbar c} \frac{\partial (\Phi_\beta u)}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\beta} - \frac{e^2}{\hbar^2 c^2} \Phi_\alpha \Phi_\beta u. \end{aligned}$$

Составляя таким же образом выражение $\Omega_\beta \Omega_\alpha u$, видим, что при вычитании первый и последний члены выпадают; средние же члены уничтожаются лишь частично. Именно, мы получаем:

$$(\Omega_\alpha \Omega_\beta - \Omega_\beta \Omega_\alpha) u = -\frac{ie}{\hbar c} \left(\frac{\partial \Phi_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_\beta} \right) u. \quad (9)$$

Скобка в правой части представляет собой «четырёхмерный ротор» четырёхмерного вектора Φ . Как известно из электродинамики, эта величина следующим образом связана с напряжённостями электрического и магнитного полей: для $\alpha, \beta = 1, 2, 3$

$$\frac{\partial \Phi_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_\beta} = \text{rot}_{\alpha\beta} A = H_{\alpha\beta}, \quad (9a)$$

для $\beta = 4, \alpha = 1, 2, 3$

$$\frac{\partial \Phi_4}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_4} = -iE_\alpha. \quad (9b)$$

(Обозначение напряжённости магнитного поля с помощью двух индексов вполне целесообразно, так как в отличие от E, H представляет собой не полярный, а аксиальный вектор.)

Собирая все члены, мы получаем из (6a):

$$\left(\sum_{\alpha=1}^4 \Omega_\alpha^2 - \frac{E_n^2}{\hbar^2 c^2} \right) u = \frac{ie}{\hbar c} \sum \gamma_\alpha \gamma_\beta H_{\alpha\beta} u + \frac{e}{\hbar c} \sum \gamma_\alpha \gamma_4 E_\alpha u. \quad (10)$$

Левая часть (10) представляет собой не что иное, как разделённую на $\hbar^2 c^2$ левую часть релятивистского уравнения Шредингера (1.13); правая же часть содержит дважды по три члена магнитного и электрического происхождения.

Таким образом, согласно Дираку, в наше прежнее релятивистское волновое уравнение (1.13) надлежит ввести эти поправочные члены. Содержа в качестве множителя волновую функцию u , они представляют собой в известном смысле нечто вроде потенциальной энергии V . Вспомним, например,

как выглядит зависящее от времени нерелятивистское волновое уравнение:

$$\Delta u + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{2m}{\hbar^2} V u$$

[см. гл. I, § 6, уравнение (9)].

Как показывает сравнение с (10), чтобы множители при u можно было рассматривать как потенциальную энергию, их следует разделить на $\frac{2m}{\hbar^2}$. Таким путём мы получаем выражения, которые естественно назвать магнитной (V_m) и электрической (V_e) частями потенциальной энергии:

$$V_m = \frac{e}{m} \frac{\hbar}{2c} i (\gamma_1 \gamma_2 H_{12} + \gamma_2 \gamma_3 H_{23} + \gamma_3 \gamma_1 H_{31}), \quad (11)$$

$$V_e = \frac{e}{m} \frac{\hbar}{2c} (-\gamma_4) (\gamma_1 E_1 + \gamma_2 E_2 + \gamma_3 E_3). \quad (12)$$

Эти формулы можно упростить, вводя вместе с Паули символический вектор σ , компоненты которого суть:

$$\sigma_1 = -i\gamma_2\gamma_3, \quad \sigma_2 = -i\gamma_3\gamma_1, \quad \sigma_3 = -i\gamma_1\gamma_2. \quad (13)$$

В силу (2) компоненты σ удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1, \\ \sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = \gamma_1\gamma_2 = +i\sigma_3 \text{ и т. д.} \end{aligned} \right\} \quad (13a)$$

Теперь вместо (11) можно написать:

$$V_m = -\frac{e}{m} \frac{\hbar}{2c} (\sigma H). \quad (14)$$

Далее, введём обозначение:

$$\tau = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4. \quad (15)$$

Тогда, как легко проверить с помощью (2),

$$\sigma_1\tau = -i\gamma_4\gamma_1, \quad \sigma_2\tau = -i\gamma_4\gamma_2, \quad \sigma_3\tau = -i\gamma_4\gamma_3, \quad (15a)$$

и мы получаем вместо (12):

$$V_e = -i \frac{e}{m} \frac{\hbar}{2c} (\sigma E)\tau. \quad (16)$$

Как мы скоро покажем, σ надлежит рассматривать как «спиновый оператор».

В формулах (14) и (16) прежде всего представляет интерес множитель

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (17)$$

Согласно т. I эта величина представляет собой не что иное, как магнетон Бора.

Итак, мы без каких-либо предположений относительно магнитных свойств электрона, *чисто формальным путём*, получили характерное выражение для его магнитного момента — и притом с правильным множителем, равным в соответствии с гипотезой Гаудсмита и Уленбека одному магнетону Бора. Этот же множитель фигурирует и в электрической энергии V_e . То обстоятельство, что релятивистски ковариантное выражение (четырёхмерный антисимметричный тензор второго ранга) можно получить, лишь вводя помимо магнитного

момента ещё и электрический, было ещё раньше отмечено Френкелем¹⁾. К физическому истолкованию этой электрической части мы ещё вернёмся в § 5 в связи с формулой (21). Она обусловлена движением магнитного момента; её волномеханическое среднее значение всегда вещественно и для покоящегося электрона обращается в нуль.

В то же время мы видим, что вектор σ определяет составляющие магнитного момента по координатным осям. Так, например, σ_1 соответствует x -компоненте, σ_2 — y -компоненте и т. д., так как в формулах (14) и (16) σ_1 множится на $H_x = H_{23}$ и $E_x = E_1$. Ниже мы рассмотрим это более подробно.

Перейдём теперь ко второй половине гипотезы Гаудсмита и Уленбека. Именно, покажем, что уравнение Дирака автоматически приводит к выводу о существовании у электрона не только магнитного момента, но и *механического* момента количества движения (*спина*). Для этого допустим, что электрон, как в атоме водорода, движется в центральном поле сил электрической природы, так что [см. (1.11а, б)]

$$\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 0, \quad e\Phi_4 = iV(r). \quad (18)$$

Будем основываться на § 3 гл. III и обозначим, как и там, символом M пространственную компоненту оператора момента количества движения. Например:

$$M_{12} = \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right). \quad (19)$$

Будучи применён к $\Omega_1 = \frac{\partial}{\partial x_1}$ или $\Omega_2 = \frac{\partial}{\partial x_2}$, этот оператор даёт:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} M_{12} \Omega_1 &= \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - \frac{\partial}{\partial x_2} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \Omega_1 M_{12} - \Omega_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} M_{12} \Omega_2 &= \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_1} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \Omega_2 M_{12} + \Omega_1. \end{aligned}$$

Далее, очевидно, $M_{12} \Omega_3 = \Omega_3 M_{12}$ и [поскольку $M_{12} V(r) = 0$] $M_{12} \Omega_4 = \Omega_4 M_{12}$. Таким образом, обозначая оператор, стоящий в левой части линейного уравнения Дирака (4), через L , мы получаем:

$$M_{12} L u - L M_{12} u = \frac{\hbar}{i} (\gamma_2 \Omega_1 - \gamma_1 \Omega_2) u. \quad (20)$$

В теории Шредингера соответствующее уравнение имело вид (в тех же предположениях относительно силового поля):

$$M_{12} L u - L M_{12} u = 0, \quad (20a)$$

где под L следует понимать левую часть обычного уравнения Шредингера или, что то же самое, классический оператор Гамильтона [см. гл. III, § 3, уравнение (24)]. Это соотношение интерпретировалось там как закон площадей в волновой механике. Следовательно, наше уравнение (20) приводит к выводу, что для *дираковского электрона закон площадей в его обычной*

¹⁾ Я. И. Френкель, *Zs. f. Phys.* **37**, 243 (1926); **47**, 786 (1928).

форме (сохранение момента импульса) не выполняется, несмотря на предположение о центральном характере силового поля.

Можно, однако, сохранить в силе закон площадей, если заменить оператор момента количества движения M на

$$N = M + \beta, \quad (21)$$

где β — гиперкомплексная величина типа γ .

Чтобы определить β , составим разность

$$NL - LN = ML - LM + \beta L - L\beta \quad (21a)$$

и рассмотрим, в частности, составляющую N_{12} . Принимая во внимание (20), мы имеем:

$$N_{12}L - LN_{12} = \frac{\hbar}{i}(\gamma_2\Omega_1 - \gamma_1\Omega_2) + \beta L - L\beta. \quad (22)$$

Если теперь подобрать β так, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{\hbar}{i}(\gamma_2\Omega_1 - \gamma_1\Omega_2) + \beta L - L\beta = 0, \quad (23)$$

то формула (22) примет вид:

$$N_{12}L = LN_{12}. \quad (24)$$

Таким образом, мы можем сказать в соответствии с принятой в (20a) терминологией, что для оператора N справедлив закон площадей.

Обратимся теперь к вычислению β . Напишем (23) в раскрытом виде, учитывая, что не зависящее от γ слагаемое в L при этом выпадает. Мы имеем:

$$\frac{\hbar}{i}(\gamma_2\Omega_1 - \gamma_1\Omega_2) + \beta \sum_{\alpha=1}^4 \gamma_{\alpha}\Omega_{\alpha} - \sum_{\alpha=1}^4 \gamma_{\alpha}\Omega_{\alpha}\beta = 0. \quad (25)$$

Коэффициенты при всех четырёх Ω_{α} должны порознь обращаться в нуль. Таким образом, получаем четыре уравнения для определения β :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\gamma_2 + \beta\gamma_1 - \gamma_1\beta &= 0, \\ -\frac{\hbar}{i}\gamma_1 + \beta\gamma_2 - \gamma_2\beta &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (25a)$$

$$\left. \begin{aligned} \beta\gamma_3 - \gamma_3\beta &= 0, \\ \beta\gamma_4 - \gamma_4\beta &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (25b)$$

В § 5 будет показано, что отсюда с необходимостью вытекает:

$$\beta = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \gamma_1\gamma_2. \quad (26)$$

Это даёт в связи с (21):

$$N_{12} = M_{12} + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \gamma_1\gamma_2$$

или, учитывая (13):

$$N_{12} = M_{12} + \frac{\hbar}{2} \sigma_3. \quad (27)$$

Аналогично получаем¹⁾:

$$N_{23} = M_{23} + \frac{\hbar}{2} \sigma_1; \quad N_{31} = M_{31} + \frac{\hbar}{2} \sigma_2. \quad (27a)$$

¹⁾ См. в связи с этим § 6 [замечания после уравнения (21a)], где после обсуждения трансформационных свойств спина уравнения (27) и (27a) будут несколько дополнены.

Возвратимся теперь к соотношению (24) и применим его к какому-нибудь решению уравнения $Lu = 0$. Поскольку левая часть обращается в нуль, ясно, что не только u , но и $N_{12}u$ удовлетворяет последнему уравнению. Мы покажем сейчас, что, как и в гл. III [§ 3; формула (30)], отсюда следует¹⁾:

$$N_{12}u = Cu; \quad (28)$$

где C — постоянная интегрирования.

Вводя полярные координаты r, ϑ, φ и выбирая обычным образом зависимость u от времени, представим функцию u в следующем виде:

$$u = R\Theta\Phi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (29)$$

Заметим при этом [см. уравнение (36), стр. 157], что

$$M_{12}u = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial \varphi}. \quad (29a)$$

Тогда уравнение (28) на основании (27) примет вид:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{\hbar}{2} \sigma_3 u = Cu. \quad (30)$$

Таким образом, u как функция φ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению с постоянными коэффициентами. Уравнения такого типа удовлетворяются экспоненциальными функциями; поэтому мы вправе положить:

$$\Phi = e^{im\varphi}, \quad (31)$$

причём в силу условий однозначности и периодичности u , m должно быть целым числом. Следовательно, мы получаем из (30):

$$\hbar \left(m + \frac{\sigma_3}{2} \right) u = Cu. \quad (32)$$

Этим уравнением определяется постоянная интегрирования C . В самом деле, мы имеем на основании (32):

$$\left(m - \frac{C}{\hbar} \right) u = -\frac{\sigma_3}{2} u$$

и, поскольку $\sigma_3^2 = 1$ [см. (13a)],

$$\left(m - \frac{C}{\hbar} \right)^2 = \frac{1}{4}.$$

Отсюда

$$C = \hbar \left(m \pm \frac{1}{2} \right). \quad (32a)$$

C имеет физический смысл постоянной в законе площадей, т. е. представляет собой составляющую момента количества движения в направлении оси z (соответствующей углу $\vartheta = 0$). В отличие от прежней теории эта составляющая уже не равна $m\hbar$, а содержит ещё дополнительное слагаемое

$$\frac{\hbar}{2}, \quad (33)$$

¹⁾ Поскольку в состоянии (29) имеет место вырождение (ибо можно положить $\Phi = \begin{pmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{pmatrix}$), следовало бы, собственно говоря, использовать здесь уравнение (32), а не (30). Фигурирующая там линейная комбинация в нашем случае, очевидно, совпадает с использованной в тексте показательной функцией (31).

которое следует истолковывать как *спин* электрона. Как видно из (32а), спин может либо складываться с орбитальным моментом, либо вычитаться из него, т. е. спин может быть ориентирован как в положительном, так и в отрицательном направлении оси z . Если бы мы выбрали другую систему координат (в которой значение $\vartheta = 0$ соответствовало бы оси x или y), то вместо σ_z в уравнение (32) вошло бы в соответствии с (27а) σ_x или σ_y . Заметим, однако, что, в то время как величина магнитного момента составляет *целый* магнетон Бора, механический момент количества движения электрона равен только *половине* квантовой единицы момента \hbar .

Таким образом, не только магнитный момент электрона, но и спин его получается чисто формальным путём, без каких-либо произвольных модельных предположений о структуре или движении электрона.

Сделаем ещё несколько замечаний о различных обозначениях и наименованиях, употребляющихся в связи с уравнением Дирака.

Мы отклонились от Дирака в том отношении, что ввели коэффициенты γ_α *симметричным* образом с четырьмя операторами Ω_α , в то время как у Дирака производная по времени особо выделена и коэффициент при ней равен единице; благодаря этому член $\frac{E_0}{\hbar c}$ у Дирака содержит множитель типа γ (а у нас он представляет собой обычное число). Уравнение Дирака в форме, приданной ему автором, получится, если умножить наше уравнение (6) на γ_4 и ввести новые обозначения:

$$\gamma_4 \gamma_1 = i\alpha_1; \quad \gamma_4 \gamma_2 = i\alpha_2; \quad \gamma_4 \gamma_3 = i\alpha_3; \quad \gamma_4 = \alpha_4.$$

Величины α удовлетворяют тем же правилам перестановки (2), что и γ . Для общих рассуждений симметричные величины γ являются более удобными. Если же в некоторых специальных задачах (при применении теории возмущений) окажется выгодным выделить временную координату, мы легко сможем перейти к величинам α или же к употреблявшимся Дираком в его первой работе ρ , σ .

Помимо собственного линеаризованного уравнения Дирака (4), мы будем пользоваться также «*итерированным*» уравнением Дирака (10). Последнее удобно в том отношении, что в нём члены с γ входят только в правую часть в качестве «спиновых поправок», в то время как левая часть его совпадает с обычным уравнением Шредингера, которое в некоторых случаях само даёт хоршее приближение.

Важным предшественником уравнения Дирака является уравнение Паули¹⁾. Как и итерированное уравнение Дирака, оно — второго порядка и также содержит члены с γ только как спиновые поправки, которые, однако, в случае уравнения Паули имеют более простой вид, в чём мы и убедимся в соответствующем месте (§ 5). Здесь достаточно только констатировать, что установление уравнения Паули явилось важным шагом на пути к раскрытию истинной природы электрона (т. е. к уравнению Дирака).

В заключение укажем на интересную связь между уравнением Дирака и наиболее общей формулировкой релятивистской метрики. Пользуясь нашими величинами γ , преобразуем четырёхмерный элемент длины

$$ds^2 = \sum_{\alpha=1}^4 dx_\alpha^2 \quad (34)$$

к выражению

$$ds = \sum_{\alpha=1}^4 \gamma_\alpha dx_\alpha \quad (35)$$

1) W. Pauli, Zs. f. Phys. 43, 601 (1927).

и примем во внимание связь между элементом длины и собственным временем:

$$ds = \pm ic d\tau, \quad d\tau = dt \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (36)$$

Комбинируя (35) и (36), мы можем написать, поделив на $d\tau$:

$$\sum_{\alpha=1}^4 \frac{\gamma_{\alpha}}{\sqrt{1 - \beta^2}} \frac{dx_{\alpha}}{dt} \mp ic = 0. \quad (37)$$

Величины $\frac{dx_{\alpha}}{dt}$, в отличие от $\frac{dx_{\alpha}}{d\tau}$, не образуют четырёхмерного вектора; первые три компоненты составляют трёхмерный вектор скорости \mathbf{v} , в то время как четвёртая, в силу условия $x_4 = ict$, равна ic .

Чтобы перейти к волновой механике, выразим \mathbf{v} через канонический импульс \mathbf{p} с помощью (1.7):

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right). \quad (38)$$

Аналогичное уравнение имеет место и для четвёртой компоненты, а именно:

$$ic = \frac{i}{m} \left(\frac{E}{c} - \frac{e}{c} \Phi \right). \quad (38a)$$

В самом деле, полная энергия E (включая и энергию покоя E_0) равна $mc^2 + e\phi$. Два предыдущих уравнения можно записать в виде единой формулы:

$$\frac{dx_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{m} \left(p_{\alpha} - \frac{e}{c} \Phi_{\alpha} \right) \begin{cases} p_{\alpha} = p, & \frac{iE}{c}, \\ \Phi_{\alpha} = A, & i\phi. \end{cases} \quad (38b)$$

Если подставить (38b) в (37), то произведение m и $\sqrt{1 - \beta^2}$ даёт m_0 и после умножения на m_0 мы получаем:

$$\sum \gamma_{\alpha} \left(p_{\alpha} - \frac{e}{c} \Phi_{\alpha} \right) \mp im_0 c = 0. \quad (39)$$

Это есть не что иное, как уравнение Дирака в символической форме, часто встречающейся в литературе. Очевидно, наше уравнение (6) получится, если в (39) положить

$$p_{\alpha} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}$$

и затем поделить всё уравнение на $\frac{\hbar}{i}$. В связи с двойным знаком в (39) следует вспомнить сделанное выше замечание об уравнениях (3) и (3a).

Только что изложенные соображения не представляют ничего принципиально нового по сравнению с началом настоящего параграфа. В обоих случаях мы имеем дело с линеаризацией некоторого квадратичного выражения с помощью величин γ : здесь это был элемент длины ds^2 , там — релятивистское уравнение Шредингера. Мы повторили здесь предыдущие рассуждения в несколько ином виде, в основном, потому, что для линейного элемента в двумерном пространстве соответствующее расщепление

$$ds^2 = (dx + idy)(dx - idy)$$

давно известно как введение «минимальных направлений».

§ 8. СОПРЯЖЁННОЕ УРАВНЕНИЕ ДИРАКА.
ЧЕТЫРЁХМЕРНЫЙ ВЕКТОР ТОКА

Как уже было установлено в гл. I, § 7, для случая уравнения Шредингера, волномеханическая задача определяется не одним, а двумя волновыми уравнениями: исходным и сопряжённым с ним. Так же обстоит дело и в релятивистском случае. Уравнение, сопряжённое с дираковским, находится по общему правилу [использованному последний раз на стр. 182 (IV.1.15)], которое мы здесь запишем в несколько изменённом виде:

$$v(\vec{L}u) - (v\vec{M})u = \text{Div } S = \sum \frac{\partial S_\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (1)$$

Стрелки, поставленные над операторами, означают, что сопряжённый с дираковским дифференциальный оператор M действует налево, а сам оператор Дирака

$$L = \sum \gamma_\alpha \Omega_\alpha + \frac{E_0}{\hbar c}, \quad \Omega_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \quad (2)$$

— направо, т. е.

$$(\vec{L}u) = \sum \gamma_\alpha \vec{\Omega}_\alpha u + \frac{E_0}{\hbar c} u. \quad (3)$$

Основываясь на этом, легко показать, что следует положить:

$$M = \sum \Omega'_\alpha \gamma_\alpha + \frac{E_0}{\hbar c}, \quad \Omega'_\alpha = -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha. \quad (4)$$

т. е.

$$(v\vec{M}) = \sum v \vec{\Omega}'_\alpha \gamma_\alpha + v \frac{E_0}{\hbar c}. \quad (5)$$

В самом деле, подставляя (3) и (5) в левую часть равенства (1), мы видим, что слагаемые, содержащие E_0 и Φ_α , взаимно уничтожаются, а оставшиеся члены имеют вид:

$$\sum \left(v \gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha u \right) = \sum \frac{\partial}{\partial x_\alpha} v \gamma_\alpha u.$$

Таким образом, выбранное нами выражение (4) для M действительно удовлетворяет условию (1). Одновременно мы получили S_α в явном виде¹⁾:

$$S_\alpha = v \gamma_\alpha u. \quad (6)$$

Если ещё функции u и v удовлетворяют волновым уравнениям

$$(v\vec{M}) = 0, \quad (\vec{L}u) = 0, \quad (7)$$

то для S_α имеет место уравнение непрерывности

$$\sum \frac{\partial S_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0. \quad (8)$$

Далее рассуждения идут совершенно так же, как и в гл. I, § 7: проинтегрируем (8) по всему пространству координат x_1, x_2, x_3 ($d\tau = dx_1 dx_2 dx_3$); тогда первые три слагаемых дадут нуль (ибо они сводятся к интегралам по

¹⁾ Вектор S_α определён с точностью до слагаемого, дивергенция которого равна нулю; это слагаемое можно положить равным нулю, что и будет сделано в дальнейшем.

бесконечно удалённой поверхности), и мы получаем:

$$\frac{\partial}{\partial x_4} \int S_4 d\tau = 0, \quad \int S_4 d\tau = \text{const (не зависит от } t\text{)}. \quad (9)$$

Это равенство справедливо для любых двух решений сопряжённых друг с другом уравнений (7). Выберем, в частности, u и v так, чтобы они принадлежали *одному и тому же состоянию*. В этом специальном случае уравнение (9) можно несколько уточнить.

В рассматриваемом случае функция v должна быть определённым образом связана с u . Эта связь устанавливается следующими двумя правилами:
а) При переходе от u к v порядок следования множителей γ изменяется на обратный. Так, например, вместо

$$\gamma_1^a \gamma_2^b \gamma_3^c \gamma_4^d \quad \text{надо писать} \quad \gamma_4^d \gamma_3^c \gamma_2^b \gamma_1^a. \quad (10a)$$

б) Кроме того, при переходе от u к v надо заменить

$$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, i \quad \text{на} \quad -\gamma_1, -\gamma_2, -\gamma_3, +\gamma_4, -i. \quad (10b)$$

Оба эти правила можно вывести, сравнивая (3) и (5). Первое из них соответствует различным направлениям действия операторов в (3) и (5) ($v\gamma$ вместо γu); второе можно получить, замечая, что изменение знака при производных в Ω' по сравнению с Ω сводится к замене γ_α на $-\gamma_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) и изменению знака при i (благодаря наличию членов $\frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha$). При $\alpha = 4$ изменение знака у производной достигается одной только заменой $+i$ на $-i$, так как координата x_4 — чисто мнимая; поэтому у γ_4 знак менять не надо. При этом следует иметь в виду, что Φ_4 — также чисто мнимая величина и, следовательно, произведение $i\Phi_4$ вещественно. Поэтому второе слагаемое в Ω_4 ($-\frac{ie}{\hbar c} \Phi_4$) не изменяется при замене $+i$ на $-i$. Более строгий вывод правил (10a) и (10b) будет дан в § 5.

Обозначим функцию v , полученную таким путём из u , через \bar{u} и образуем из u и \bar{u} величину S_4 . Так же как и в гл. I [см. (1.7.6)], будем считать эту величину пропорциональной «плотности вероятности» ρ .

$$S_4 = \bar{u}\gamma_4 u = \rho\Gamma. \quad (11)$$

Однако в данном случае [в отличие от (1.7.6)] множитель пропорциональности Γ не является обычным числом, а зависит от γ — только тогда функцию ρ можно рассматривать как обычное число, что необходимо в связи с ее физическим истолкованием. В дальнейшем — в § 5 [см. (5.30)] — мы обсудим, каким образом целесообразно определить множитель Γ ; пока же отметим только, что он должен быть отождествлён с константой, фигурирующей в (9). В самом деле,

$$\int \rho d\tau = 1$$

(«вероятность того, что электрон находится где-нибудь в пространстве, равна единице»). Поэтому из (11) следует:

$$\int S_4 d\tau = \int \bar{u}\gamma_4 u d\tau = \Gamma \int \rho d\tau = \Gamma, \quad (12)$$

что и требовалось доказать.

Равенство (12) представляет собой условие нормировки для функций u , \bar{u} . Как и в случае уравнения Шредингера (см. стр. 48), оно оставляет неопределённой фазу волновой функции.

Тот же самый множитель Γ входит и в определение тока в состоянии u . Мы потребуем, во-первых, чтобы выражение для тока j , как и для ρ , не содержало множителей типа γ и, во-вторых, чтобы выполнялось обычное гидродинамическое уравнение непрерывности:

$$\operatorname{div} j + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (13)$$

Последнее соотношение должно, естественно, совпадать с (8). Чтобы сравнить их, умножим (13) на $\frac{\Gamma}{ic}$, тогда $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ превратится в фигурирующую в (8) производную $\frac{\partial S_4}{\partial x_4}$. Приравнявая друг к другу остальные слагаемые соответственно в (8) и в (13), мы получаем:

$$j_k \Gamma = ic S_k = ic \bar{u} \gamma_k u \quad (k = 1, 2, 3). \quad (13a)$$

Наконец, (11) и (13a) можно объединить в единую четырёхмерную формулу:

$$(j, ic\rho)\Gamma = ic(S_1, S_2, S_3, S_4). \quad (14)$$

Казалось бы, определённый здесь четырёхмерный вектор тока существенно отличается от получавшегося в теории Шредингера (I.7.7). Однако это не так, как показывает следующее поучительное преобразование¹⁾. Будем исходить из формулы (6):

$$S_\beta = v \gamma_\beta u \quad (\beta = 1, 2, 3, 4).$$

Перепишем это соотношение два раза, подставив в него один раз v из сопряжённого уравнения (5) [$(\overleftarrow{v}M) = 0$]:

$$v = \frac{\hbar c}{E_0} \sum \left(\frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha v \gamma_\alpha \right),$$

а другой раз u из основного уравнения (3) [$(\overrightarrow{L}u) = 0$]:

$$u = \frac{\hbar c}{E_0} \sum \left(-\gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \gamma_\alpha u \right).$$

Первый раз мы получим:

$$S_\beta = \frac{\hbar c}{E_0} \sum \frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha \gamma_\beta u + \frac{ie}{E_0} \sum \Phi_\alpha v \gamma_\alpha \gamma_\beta u;$$

во второй раз будет:

$$S_\beta = \frac{\hbar c}{E_0} \sum \left(-v \gamma_\beta \gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{ie}{E_0} \sum \Phi_\alpha v \gamma_\beta \gamma_\alpha u.$$

Составляя полусумму этих выражений, находим:

$$S_\beta = \frac{\hbar c}{2E_0} \sum \left(\frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha \gamma_\beta u - v \gamma_\beta \gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{ie}{2E_0} \sum \Phi_\alpha (v \gamma_\alpha \gamma_\beta u + v \gamma_\beta \gamma_\alpha u). \quad (15)$$

В силу перестановочных соотношений для γ во второй сумме исчезают все члены с $\alpha \neq \beta$ и остаётся только

$$\frac{ie}{E_0} \Phi_\beta v u. \quad (15a)$$

¹⁾ W. Gordon, *Zs. f. Phys.* 50, 630 (1928); E. Schroedinger, *Berliner Akademie*, 1930, стр. 418; 1931, стр. 63.

В первой сумме в (15) выделим член с $\alpha = \beta$:

$$\frac{\hbar c}{2E_0} \left(\frac{\partial v}{\partial x_\beta} u - v \frac{\partial u}{\partial x_\beta} \right). \quad (156)$$

Складывая (15а) и (156) и умножая результат на ic [см. (13а)], мы получаем при $\beta = 1, 2, 3$:

$$icS' = \frac{i\hbar}{2m_0} (\text{grad } v \cdot u - v \cdot \text{grad } u) - \frac{e}{m_0 c} \Phi v u. \quad (16)$$

Это — не что иное, как выражение для шредингеровского тока [см. формулу (7) на стр. 47], в котором вместо u^* поставлено v , вместо $A - \Phi$ и несколько изменён несущественный там порядок следования множителей. Следуя Гордону, мы назовём (16) *током проводимости*; он формально не зависит от величин γ (последние входят лишь в u и v). Однако в первой сумме в (15) имеются ещё члены с $\alpha \neq \beta$. Будучи помножены на ic , они дают *ток поляризации*

$$icS''_\beta = \frac{i\hbar}{2m_0} \sum' \left(\frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha \gamma_\beta u - v \gamma_\beta \gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right) = \frac{i\hbar}{2m_0} \sum' \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (v \gamma_\alpha \gamma_\beta u). \quad (17)$$

Последнее преобразование возможно в силу правил перестановки величин γ , так как в данном случае $\alpha \neq \beta$ (это обстоятельство отмечается штрихом у знака суммы).

Положим далее:

$$\left. \begin{aligned} M_{\alpha\beta} &= -\frac{i\hbar}{2m_0} v \gamma_\alpha \gamma_\beta u & (\alpha, \beta = 1, 2, 3), \\ P_\beta &= \frac{\hbar}{2m_0} v \gamma_\beta u & (\beta = 1, 2, 3) \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

и назовём, следуя Гордону (см. примечание на стр. 197), M — магнитной, а P — электрической поляризацией единицы объёма.

Тогда мы получим, например:

$$icS''_1 = + \frac{\partial M_{12}}{\partial x_2} - \frac{\partial M_{31}}{\partial x_3} + \frac{1}{c} \frac{\partial P_1}{\partial t};$$

в общем же виде, принимая во внимание, что $M_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha}$, мы будем иметь:

$$icS'' = \text{rot } M + \frac{1}{c} \frac{\partial P}{\partial t}. \quad (19)$$

В принятой нами сейчас форме записи ток поляризации явно зависит от величин γ . Он обусловлен наличием спина и потому отсутствует в теории Шредингера. Для физического истолкования поляризационного тока следует, как и в (14), отщепить в нём множитель Γ ; то же относится и к определениям (18) величин M и P .

Пока что мы говорили только о плотности и токе в данном состоянии. Можно было бы рассмотреть *комбинированный* четырёхмерный вектор тока S , образованный с помощью волновых функций двух различных состояний. Его определение содержится в формуле (6), в которую в качестве u и v можно подставить произвольные решения уравнений $(v\vec{M}) = 0$ и $(\vec{L}u) = 0$. В этом случае также имеют место уравнение непрерывности (8) и, следовательно, формула (9). Рассмотрим, в частности, два стационарных состояния:

$$u_n = \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad v_m = \bar{\psi}_m e^{+\frac{i}{\hbar} E_m t}.$$

Вследствие уравнения непрерывности мы получаем, согласно (9):

$$\int \bar{\psi}_m \gamma_4 \psi_n d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} = \text{const.} \quad (20)$$

Как было подчёркнуто в связи с уравнением (9), символ «const» означает величину, не зависящую от времени t . Но левая часть (20) при $E_m \neq E_n$ от t зависит. Эти два обстоятельства можно совместить, только если «const» равна нулю. Таким образом, мы непосредственно приходим к доказательству *ортогональности* собственных функций уравнения Дирака:

$$\int \bar{\psi}_m \gamma_4 \psi_n d\tau = 0. \quad (21)$$

В заключение следует указать на рассмотренный в дополнении 14 вариационный принцип, из которого следует изложенная в начале настоящего параграфа связь между u , v , L , M .

§ 4. ПРИМЕР — СВОБОДНОЕ ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА

Как и в нерелятивистском случае (гл. I, § 2), движение электрона в отсутствие внешних сил описывается плоской волной. Мы воспользуемся этим математически простейшим случаем для того, чтобы получить некоторую предварительную практику вычислений с величинами γ .

В соответствии с (2.3) дифференциальное уравнение нашей задачи имеет вид:

$$\sum_{\alpha=1}^4 \left(\gamma_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + \frac{E_0}{\hbar c} \right) u = 0. \quad (1)$$

По аналогии с (1.2.8) полагаем:

$$u = \psi e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \psi = A e^{i(k \cdot r)}. \quad (2)$$

Здесь k представляет собой волновой вектор (размерности обратной длины); «амплитуда» A зависит от γ и, следовательно, в отличие от ω и k не является обычным числом. Подставляя (2) в (1), мы получаем (вектор $\gamma = \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$):

$$i(\gamma k) - \gamma_4 \frac{\omega}{c} + \frac{E_0}{\hbar c} A = 0. \quad (3)$$

Условие разрешимости этого уравнения можно найти, умножая (3) слева на

$$i(\gamma k) - \gamma_4 \frac{\omega}{c} - \frac{E_0}{\hbar c}. \quad (4)$$

Тогда, в силу соотношений (2.2), все множители γ исчезают, и мы получаем:

$$\left[k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} + \left(\frac{E_0}{\hbar c} \right)^2 \right] A = \left(k^2 + \frac{E_0^2 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right) A = 0,$$

откуда, поскольку A не должно быть тождественно равно нулю,

$$k^2 - \frac{E^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2} = 0. \quad (5)$$

Эта формула представляет собой не что иное, как известное выражение для энергии свободно движущегося электрона. В самом деле, в силу соотношения де Бройля

$$p = \hbar k, \quad (6)$$

(5) переходит в формулу (1.4) (при $V = 0$):

$$c^2 p^2 = E^2 - E_0^2. \quad (7)$$

Наоборот, можно было бы сказать, что уравнение (5) представляет обещанный ранее [в связи с (V.2.19)] вывод формулы де Бройля из уравнения Дирака. Поскольку сюда входит релятивистский импульс p , вновь доказано, что под m в формуле де Бройля следует понимать полную массу, а не только массу покоя.

Формула (5) приобретает особенно симметричный вид, если положить по определению

$$k_\alpha = \frac{i\omega}{c} = \frac{iE}{\hbar c}, \quad k_0 = \frac{E_0}{\hbar c}. \quad (8)$$

Действительно, тогда (5) переходит в

$$\sum k_\alpha^2 = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, 4. \quad (8a)$$

Обозначения (8) (особенно первое из них) будут полезны нам и в дальнейшем.

Установив условия разрешимости уравнения (3), перейдем теперь к самому решению его, т. е. к вычислению A . Легко непосредственно убедиться, что A должно быть пропорционально выражению (4):

$$A = \left(i(\gamma k) - \gamma_4 \frac{\omega}{c} - \frac{E_0}{\hbar c} \right) F. \quad (9)$$

Здесь F — коэффициент пропорциональности, который ещё может произвольно зависеть от γ . Существенно, что он стоит после скобки в (9). Действительно, именно при таком порядке множителей при подстановке (9) в (3) в результате перемножения двух скобок возникает обращающееся в нуль выражение (5); тем самым уравнение (3) удовлетворяется при любом выборе F .

Пользуясь обозначениями (8), можно переписать (9) в более симметричном виде:

$$A = (i \sum \gamma_\alpha k_\alpha - k_0) F, \quad \alpha = 1, 2, 3, 4. \quad (9a)$$

В то же время и экспоненциальные множители в (2) объединяются в симметричное выражение

$$e^{i(\hbar v) - i\omega t} = e^{i \sum k_\alpha x_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3, 4, \quad x_4 = ict,$$

и (2) принимает следующий окончательный вид:

$$u = (i \sum \gamma_\alpha k_\alpha - k_0) F e^{i \sum k_\alpha x_\alpha}. \quad (10)$$

Экспоненциальный множитель можно было бы написать здесь в любом месте, но коэффициент F , как уже говорилось, обязательно должен стоять *после* скобки.

В столь же простом виде можно написать и решение сопряжённого уравнения Дирака (3.5) (в отсутствии внешних сил):

$$- \sum_{\alpha=1}^4 \frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha + v \frac{E_0}{\hbar c} = 0; \quad (11)$$

именно, мы получаем:

$$v = \bar{F} (i \sum \gamma_\alpha k_\alpha - k_0) e^{-i k_\alpha x_\alpha}. \quad (12)$$

Это выражение соответствует правилам, указанным на стр. 196, и потому удовлетворяет уравнению (11). При этом следует иметь в виду, что требуемое правилом (3.10б) изменение знака у $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ компенсируется соответствующим изменением знака у i , а величины ik_α и k_0 вещественны.

\bar{F} представляет собой сопряжённую с F величину, которая должна стоять *перед* скобками в (12). В соответствии с правилом (3.10а) она получается из F изменением порядка следования всех множителей γ . Как и (10), формула (12) описывает плоскую волну, распространяющуюся в направлении волнового вектора k .

Образует теперь с помощью (10) и (12) четырёхмерный вектор тока. Он оказывается не зависящим от координат x и t и в соответствии с (3.6) определяется формулой

$$S_\alpha = \bar{F} G \gamma_\alpha G F, \quad (13)$$

где для краткости введено обозначение

$$G = i \sum \gamma_\beta k_\beta - k_0. \quad (14)$$

В соответствии с требованием, сформулированным в связи с (3.14), отношения компонент S_α не должны зависеть от γ . Как мы сейчас увидим, в нашем — особенно простом — случае это обеспечивается особыми свойствами G .

Рассмотрим, помимо G , ещё величину

$$G_- = -i \sum \gamma_\alpha k_\alpha - k_0. \quad (15)$$

Перемножая G и G_- , находим, принимая во внимание правила перестановки γ :

$$GG_- = G_-G = \sum_{\alpha=0}^4 k_\alpha^2 = 0 \quad [\text{в силу (8a)}]. \quad (16)$$

По этой причине (см. следующий параграф) величины G и G_- называются *делителями нуля*. Их особенности выявляются, если составить ещё выражения G^2 и G_-^2 . Мы имеем:

$$G^2 = -\sum k_\beta^2 - 2ik_0 \sum \gamma_\beta k_\beta + k_0^2 = -2ik_0 \sum \gamma_\beta k_\beta + 2k_0^2 = -2k_0 G. \quad (17a)$$

Аналогично

$$G_-^2 = -2k_0 G_-. \quad (17b)$$

Мы видим, что при делении (17а) на G [или (17б) на G_-] получается неверный результат:

$$G = G_- = -2k_0.$$

«На делитель нуля делить нельзя».

Составим теперь произведение $\gamma_\alpha G$ и преобразуем его, перенося γ_α направо от G . Тогда в (14) все слагаемые (кроме того, в котором $\alpha = 0$) меняют знак. Поэтому, как видно из сопоставления (14) и (15), можно написать:

$$\gamma_\alpha G = G_- \gamma_\alpha + 2ik_\alpha$$

и, следовательно,

$$G \gamma_\alpha G = GG_- \gamma_\alpha + 2ik_\alpha G.$$

Первый член в правой части этого равенства в силу (16) обращается в нуль. Следовательно, (13) принимает вид:

$$S_\alpha = 2ik_\alpha \bar{F}GF. \quad (18)$$

Таким образом, при любом F отношения компонент нашего четырёхмерного вектора S не зависят от γ : $S_1:S_2:S_3:S_4 = k_1:k_2:k_3:k_4$.

Мы можем, например, написать:

$$S_\alpha = \frac{k_\alpha}{k_4} S_4, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (19)$$

или, в силу (3.14):

$$j = \frac{k}{k_4} icp.$$

Теперь формулы (8) и (6) дают:

$$j = k \frac{\hbar c^2}{E} \rho = \frac{k\hbar}{m} \rho = \frac{p}{m} \rho, \quad (20)$$

т. е.

$$j = v\rho. \quad (20a)$$

Это означает, что мы имеем дело с потоком частиц, распределённых с плотностью ρ и движущихся со скоростью $v = \frac{p}{m}$.

Простой результат (18) был получен нами формально — как следствие особой природы делителя нуля G . Можно было бы придти к нему и исходя непосредственно из уравнений (1) и (11) для u и v . Принимая во внимание указанную в (10) и (12) зависимость u и v от x_α , эти уравнения можно переписать в виде:

$$\left. \begin{aligned} (i \sum \gamma_\alpha k_\alpha + k_0) u &= 0, \\ v (i \sum \gamma_\alpha k_\alpha + k_0) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Умножим первое из уравнений (21) слева на $v\gamma_\beta$, второе — справа на $\gamma_\beta u$ и сложим. Учитывая правила перестановки γ , мы получаем:

$$ik_\beta v u = -k_0 v \gamma_\beta u = -k_0 S_\beta. \quad (22)$$

Как и (18), это равенство означает, что отношения компонент четырёхмерного вектора S не зависят от γ .

Наконец, мы должны пронормировать волновые функции u и v , для чего надлежит обратиться к условию (3.12).

Прежде всего оказывается, что, для того чтобы применить это условие в случае плоской волны, требуются некоторые дополнительные рассуждения. Действительно, интеграл, взятый по бесконечному пространству, в данном случае расходуется, так как подинтегральное выражение постоянно. Мы можем выйти из положения, считая, что плоская волна распространяется не в бесконечном пространстве, а в некотором конечном объёме V (например, в кубе).

Тогда $\int d\tau = V$, и мы получаем из (18) и (8):

$$\int S_4 d\tau = 2ik_4 V \bar{F}GF = -2 \frac{EV}{\hbar c} \bar{F}GF. \quad (23)$$

Но, согласно (3.12), должно иметь место равенство

$$\int S_4 d\tau = \Gamma. \quad (24)$$

Таким образом, в нашем случае введённая в § 3 величина Γ даётся формулой

$$\Gamma = -2 \frac{EV}{\hbar c} \bar{F} G F. \quad (25)$$

В силу произвольности F величина Γ также в широких пределах произвольна; однако благодаря присутствию множителя G она должна обладать свойствами делителя нуля. Для S_4 мы получаем на основании (24):

$$S_4 = \frac{\Gamma}{V}. \quad (26)$$

Сопоставляя (26) с (3.14), приходим к непосредственно очевидному выражению для плотности

$$\rho = \frac{1}{V} \quad (\text{одна частица в объёме } V)$$

и, в силу (20а), для тока

$$j = \frac{v}{V}.$$

Резюмируем теперь всё, что мы выяснили на рассмотренном простом примере. В выражения для волновых функций u , v и соответственно для четырёхмерного вектора S входят величины γ . Однако в нашем случае во всех четырёх компонентах S_α можно выделить общий гиперкомплексный множитель Γ , который является в известных пределах произвольным и потому не имеет физического смысла. Физический смысл имеют лишь умноженные на Γ вещественные числа, интерпретируемые как ток j и плотность ρ . Тот же множитель Γ входит и в условие нормировки волновых функций.

§ 5. ГРУППА ГИПЕРКОМПЛЕКСНЫХ ЧИСЕЛ И ЕЁ ПОДГРУППЫ — КВАТЕРНИОНЫ И БИКВАТЕРНИОНЫ

Мы ввели в рассмотрение четыре гиперкомплексные единицы γ . Перемножая их друг с другом и с обычной единицей, можно образовать

$$1 + 4 + 6 + 4 + 1 = 16$$

различных, не сводящихся друг к другу элементов. Расположим их следующим образом:

$$\left. \begin{array}{l} 1, \\ \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \\ \gamma_{12}, \gamma_{23}, \gamma_{31}, \gamma_{14}, \gamma_{24}, \gamma_{34}, \\ \gamma_{123}, \gamma_{234}, \gamma_{341}, \gamma_{412}, \\ \gamma_{1234}, \end{array} \right\} \quad (1)$$

где γ_{12} сокращённо обозначает произведение $\gamma_1 \gamma_2$ и т. д. Ясно, что любое другое произведение величин γ можно, применяя фундаментальные соотношения

$$\gamma_\alpha^2 = 1, \quad \gamma_{\alpha\beta} = -\gamma_{\beta\alpha}, \quad (2)$$

свести к одному из элементов (1) (может быть, с точностью до множителя — 1). В частности, при перемножении выписанных шестнадцати величин вновь получаются элементы (1). Таким образом, эти величины образуют

группу 16-го порядка. Число в «теле» γ состоит, вообще говоря, из 16 членов:

$$A = a_0 + a_1\gamma_1 + \dots + a_{15}\gamma_{1234}, \quad (3)$$

где a_0, a_1, \dots, a_{15} — обычные комплексные числа. Произведение двух чисел (3) принадлежит тому же телу, что и сомножители.

Покажем, как надо производить вычисления в теле γ , на примере введенной на стр. 191 величины β . О ней известно только то, что она принадлежит данному телу и удовлетворяет уравнениям (2.25а) и (2.25б). Согласно (2.25б)

$$\text{а) } \beta \text{ коммутирует с } \gamma_2 \text{ и } \gamma_4.$$

Из (2.25а) легко находим, что

$$\text{б) } \beta \text{ коммутирует с } \gamma_{12}.$$

Действительно, умножая первое из уравнений (2.25а) слева на γ_1 , второе — справа на γ_2 и складывая их, получаем: $\gamma_1\beta\gamma_1 - \gamma_2\beta\gamma_2 = 0$, т. е. $\beta\gamma_1 = \gamma_1\beta$ и $\beta\gamma_2 = \gamma_2\beta$, что и требовалось доказать.

Положим теперь в соответствии с (3)

$$\beta = c_0 + c_1\gamma_1 + \dots + c_{15}\gamma_{1234}.$$

Из а) следует, что в данном случае должны обращаться в нуль все c_k , кроме четырёх:

$$\text{в) } \beta = c_0 + c'\gamma_{12} + c''\gamma_{34} + c'''\gamma_{341}.$$

Этот вывод основывается на теореме о *единственности* представления (3), т. е. на том обстоятельстве, что из уравнения

$$0 = a_0 + a_1\gamma_1 + \dots + a_{15}\gamma_{1234}$$

с необходимостью вытекает:

$$a_0 = a_1 = \dots = a_{15} = 0.$$

В самом деле, к формуле в) можно придти, потребовав, чтобы β коммутировало, например, с γ_2 . Вычисляя соответствующую перестановку, находим:

$$0 = 2c_1\gamma_{12} + 2c_2\gamma_{23} - 2c_4\gamma_{34} + 2c_6\gamma_2 - 2c_7\gamma_1 - 2c_{10}\gamma_4 - 2c_{14}\gamma_{1234} - 2c_{15}\gamma_{412}.$$

Таким образом, все коэффициенты c_k должны обращаться в нуль. Далее накладывается ещё условие перестановочности β с γ_4 , и в результате остаются только выписанные в в) коэффициенты c_k . Пользуясь затем условием б), аналогичным путём находим, что $c' = c'' = 0$, т. е.

$$\text{г) } \beta = c_0 + c\gamma_{12}.$$

Член c_0 можно отбросить как несущественный. В самом деле, величина N определяется уравнением (2.21) лишь с точностью до произвольного постоянного слагаемого, поскольку оно, как и c_0 , является обычным числом. Поэтому вместо г) можно с равным успехом написать:

$$\text{д) } \beta = c\gamma_{12}.$$

Подставляя теперь д) в первую или вторую из формул (2.25а), легко находим константу c . Оба уравнения дают в согласии друг с другом

$$c = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{l},$$

чем и доказывается наше утверждение (2.26).

Рассмотрим теперь вопрос о подгруппах нашей 16-членной группы. Поскольку их порядки должны быть делителями 16, могут быть только подгруппы порядков

$$8, 4 \text{ или } 2,$$

т. е. состоящие из

$$8, 4 \text{ или } 2 \text{ элементов.}$$

Подгруппу из восьми элементов мы получаем, отбрасывая одну из четырёх исходных единиц γ и образуя все возможные комбинации из оставшихся γ . Можно поступить и иначе: сохранить только элементы, представляющие собой произведения *чётного* числа единиц γ . Получающиеся таким путём «восьмичленные группы» *изоморфны* друг другу, т. е. их элементы можно поставить во взаимно однозначное соответствие так, что произведения соответствующих элементов также соответствуют друг другу. Так, например, элементы подгруппы чётных произведений (взятые, когда нужно, с множителем l) и подгруппы, построенной на первых трёх единицах γ , могут быть сопоставлены друг с другом по следующей схеме:

$$1 \quad l\gamma_{14} \quad l^2\gamma_{24} \quad l^3\gamma_{34} \quad \gamma_{12} \quad \gamma_{23} \quad \gamma_{31} \quad l\gamma_{1234} \quad (4)$$

$$1 \quad \gamma_1 \quad \gamma_2 \quad \gamma_3 \quad \gamma_{12} \quad \gamma_{23} \quad \gamma_{31} \quad \gamma_{123} \quad (5)$$

Действительно, если перемножить, с одной стороны, любые два элемента верхней строки и, с другой стороны, стоящие под ними элементы нижней строки, то произведение вторых окажется расположенным под произведением первых.

Подгруппа из четырёх элементов получается, если из 16 величин (1) сохранить только элементы, содержащие лишь две какие-либо единицы γ , например γ_1 и γ_2 :

$$1, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_{12}. \quad (6)$$

Можно также исходить из схемы (4), вычеркнув в ней все элементы, содержащие определённую единицу γ (например, γ_4). Мы получим тогда:

$$1, \gamma_{21}, \gamma_{32}, \gamma_{13}. \quad (7)$$

Используя спиновый оператор (2.13), можно переписать это в виде:

$$1, -l\sigma_3, -l\sigma_1, -l\sigma_2. \quad (7a)$$

Все эти четырёхчленные подгруппы *изоморфны* друг другу и *группе кватернионов*, которая обычно строится на элементах

$$1, l, j, k, \quad (8)$$

удовлетворяющих следующим соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} l^2 = j^2 = k^2 = -1, \\ lj = -jl = k, \quad jk = -kj = l, \quad kl = lk = j. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Действительно, если элементы (7) или (7a) поставить в соответствие расположенным под ними величинам (8), то, как легко убедиться, для (7) и (7a) справедливы те же соотношения (9). Изоморфизм группы кватернионов и (6) станет очевидным, если вместо (6) написать:

$$1, l\gamma_1, l\gamma_2, \gamma_{21}.$$

Восьмичленную группу, построенную на элементах (4) или (5), называют также *группой бикватернионов*.

Подгруппа из двух элементов получится, если, кроме обычной единицы, оставить только одну из величин, например $i\gamma_1$ или γ_{12} . Получающиеся таким путём двучленные группы изоморфны группе обычных комплексных чисел:

$$1, i.$$

Уравнение Дирака определено в теле из всех 16 элементов (1). Соответственно его решения по аналогии с (3) можно подставить в 16-членном виде:

$$u = u_0 + u_1\gamma_1 + \dots + u_{15}\gamma_{1234}. \quad (10)$$

Подставляя выражение (10) в уравнение (2.4), преобразуя возникающие при этом произведения величин γ к виду (1) и отдельно приравнивая нулю коэффициенты при каждом элементе (1), мы получаем систему из 16 дифференциальных уравнений первого порядка, определяющих неизвестные функции u_0, \dots, u_{15} ; значения последних определены уже в области обычных комплексных чисел. Однако эта процедура является слишком громоздкой и её следует упростить, последовательно уменьшая число уравнений с учётом того обстоятельства, что физически существенные величины (ток, плотность и т. д.) выражаются с помощью формул, содержащих лишь по одной величине типа γ (см. конец предыдущего параграфа).

С другой стороны, *итерированное* уравнение Дирака (2.10) определено в теле *бикватернионов*. В самом деле, в (2.10) входят только произведения (4) чётного числа исходных единиц γ . Соответственно решения итерированного уравнения Дирака можно записать в восьмичленном виде:

$$u = u_0 + u_1\gamma_{12} + \dots + u_7\gamma_{1234}, \quad (11)$$

где функции u_0, \dots, u_7 суть решения системы восьми дифференциальных уравнений второго порядка. Можно сказать, таким образом, что в смысле числа неизвестных функций решать итерированное уравнение Дирака вдвое легче, чем исходное.

Мы добьёмся гораздо большего упрощения задачи, если сумеем ограничиться при интеграции уравнения Дирака только *группой кватернионов*. Это приводит к уже упоминавшемуся на стр. 193 *уравнению Паули*.

Будем рассматривать только стационарный случай:

$$u = \psi e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = \psi e^{-\frac{E}{\hbar c} \omega t}.$$

Тогда уравнение Дирака (2.4) принимает вид:

$$\left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right) - \gamma_4 \frac{E - V}{\hbar c} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \psi = 0. \quad (12)$$

Постараемся исключить отсюда γ_4 . С этой целью положим:

$$\psi = (1 + \gamma_4)\psi^+ + (1 - \gamma_4)\psi^-. \quad (13)$$

Если, как в (12), α принимает значения 1, 2, 3, то

$$\gamma_{\alpha}(1 \pm \gamma_4) = (1 \mp \gamma_4)\gamma_{\alpha}. \quad (13a)$$

Далее,

$$\gamma_4(1 \pm \gamma_4) = \pm(1 \pm \gamma_4). \quad (13b)$$

Подставляя (13) и (12), находим на основании (13а) и (13б):

$$(1 + \gamma_4) \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right) \psi^{-} - \frac{E - E_0 - V}{\hbar c} \psi^{+} \right\} + \\ + (1 - \gamma_4) \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right) \psi^{+} + \frac{E + E_0 - V}{\hbar c} \psi^{-} \right\} = 0. \quad (14)$$

Умножим это уравнение слева один раз на $1 + \gamma_4$, а другой раз на $1 - \gamma_4$. Замечая, что

$$(1 \pm \gamma_4)^2 = 2(1 \pm \gamma_4), \quad (14а)$$

а

$$(1 \pm \gamma_4)(1 \mp \gamma_4) = 0, \quad (14б)$$

видим, что в первом случае выпадает второе слагаемое в (14), а во втором — первое. Следовательно, выражения в фигурных скобках должны порознь обращаться в нуль, и вместо одного уравнения (14) мы получаем систему двух уравнений, не содержащих γ_4 :

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right) \psi^{-} - \frac{E - E_0 - V}{\hbar c} \psi^{+} &= 0, \\ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right) \psi^{+} + \frac{E + E_0 - V}{\hbar c} \psi^{-} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Таким образом, исключив γ_4 , мы свели 16-членную группу к группе бикватернионов [остались только три единицы γ — см. (5)].

Чтобы придти далее к группе кватернионов, постараемся исключить ψ^{-} . Для этой цели умножим второе из уравнений (15) на

$$\frac{\hbar c}{E + E_0 - V}$$

и применим к нему слева оператор

$$Q = \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\alpha} \right).$$

Подставляя значение $Q\psi^{-}$ из первого уравнения (15) и полагая $\varphi = \psi^{+}$, находим:

$$Q \frac{\hbar c}{E + E_0 - V} Q\varphi + \frac{E - E_0 - V}{\hbar c} \varphi = 0. \quad (16)$$

Первое слагаемое здесь можно представить в виде суммы двух членов:

$$I = \frac{\hbar c}{E + E_0 - V} Q^2 \varphi, \quad II = \frac{\hbar c}{(E + E_0 - V)^2} \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \frac{\partial V}{\partial x_{\alpha}} Q\varphi.$$

Первый из них вычисляется точно так же, как на стр. 188 (с той лишь разницей, что здесь индекс α принимает три, а не четыре значения). При этом получаются члены, во-первых, не зависящие от γ и, во-вторых, содержащие величины $\gamma_{\alpha\beta}$; последние, как и раньше, можно заменить спиновым

вектором $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ (2.13), и окончательно мы получим:

$$I = \frac{\hbar c}{E + E_0 - V} \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right)^2 \varphi + \frac{e}{\hbar c} (\sigma, H) \varphi \right\}. \quad (17)$$

Здесь первое слагаемое возникло от членов с $\alpha = \beta$, второе — с $\alpha \neq \beta$. Равным образом и II раскладывается в сумму двух членов, соответствующих $\alpha = \beta$ и $\alpha \neq \beta$. Выражая Q через «элементарный импульс» $m\mathfrak{p}$ [см. (1.7)], обозначаемый впредь через \mathfrak{p} :

$$\mathfrak{p}_\alpha = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad Q = \frac{i}{\hbar} \sum \gamma_\alpha \mathfrak{p}_\alpha, \quad (18)$$

и полагая

$$\frac{\partial V}{\partial x_\alpha} = -eE_\alpha,$$

мы без труда получаем:

$$\text{II} = \frac{ce}{(E + E_0 - V)^2} \left\{ -i(E\mathfrak{p})\varphi + \sigma, [E\mathfrak{p}]\varphi \right\}. \quad (19)$$

Подставляя теперь (17) и (19) в (16) и умножая результат на $\frac{\hbar}{2m_0c}(E + E_0 - V)$, находим окончательно:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{2m_0} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\alpha \right)^2 \varphi + \frac{(E - V)^2 - E_0^2}{2E_0} \varphi = \\ & = -\frac{e\hbar}{2m_0c} (\sigma, H) \varphi - \frac{e\hbar}{2m_0(E + E_0 - V)} \left\{ \sigma, [E, \mathfrak{p}]\varphi - i(E, \mathfrak{p}) \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

В уравнении (20) фигурирует только спиновый оператор σ . Таким образом, задача сводится к группе кватернионов. Левая часть (20), будучи приравнена нулю, совпадает с релятивистским уравнением Шредингера (1.9) для стационарного случая. Соответственно члены в правой части следует истолковывать как спиновые поправки.

Первый из них нам уже знаком. В качестве постоянного множителя там фигурирует магнетон¹⁾ μ [см. (2.13)]; сам же этот член в силу (2.14) совпадает с $V_m\varphi$. Второй член мы упростим, пренебрегая в знаменателе величиной V по сравнению с E_0 и полагая $E + E_0 = 2m_0c^2$. Тем самым мы переходим на точку зрения уравнения Паули, которое было предназначено для учёта релятивистских поправок первого порядка (не очень большие скорости). Рассматриваемое выражение при этом примет вид (мы полагаем $\mathfrak{p} = m\mathfrak{v} = m_0\mathfrak{v}$, что возможно в силу первого предположения):

$$\frac{1}{2} \mu \left(\sigma, \left[E, \frac{\mathfrak{v}}{c} \right] \right) \varphi. \quad (21)$$

Как известно, формула

$$e \left[\frac{\mathfrak{v}}{c}, H \right]$$

описывает силу, с которой магнитное поле H действует на движущийся заряд e , а

$$\mu \left[E, \frac{\mathfrak{v}}{c} \right]$$

1) В последующем подсчёте различием между m и m_0 можно пренебречь

— силу, с которой электрическое поле действует на движущийся магнитный полюс μ (в данном случае — диполь величиной в один магнетон). Будучи скалярно умножено на σ , последнее выражение представляет часть потенциальной энергии (и, следовательно, гамильтониана) движущегося магнетона, обусловленную электрическим полем. Поскольку в (21) имеется ещё множитель $1/3$, эта формула точно совпадает с поправкой Томаса (см. т. I, дополнение 12, п. 7). Последняя, конечно, и должна была сама собой появиться при последовательной (по Паули) аппроксимации результатов релятивистской теории, каковой является теория Дирака.

Наконец, последний член в (20) в том же приближении имеет вид:

$$\frac{i}{2} \mu \left(E, \frac{\mathbf{v}}{c} \right) \varphi. \quad (21a)$$

Он отсутствует в первоначальной форме уравнения Паули и, повидимому, не поддается простому электродинамическому истолкованию.

Нужно ещё объяснить, почему мы исключали выше именно ψ^- , а не ψ^+ , и удовлетворялись нахождением только этой последней функции. Причина заключается в относительном порядке величины ψ^- и ψ^+ . Именно, перепишем уравнения (15), вводя символический вектор скорости \mathbf{v} , для чего умножим (15) на $\frac{\hbar}{im}$ и положим:

$$E - E_0 = W, \quad E + E_0 - V \sim 2mc^2.$$

Мы получим:

$$(\boldsymbol{\gamma}, \mathbf{v}) \psi^- = \frac{W - V}{imc} \psi^+, \quad (\boldsymbol{\gamma}, \mathbf{v}) \psi^+ = 2ic \psi^-. \quad (22)$$

Будем рассматривать символ v как настоящую скорость и положим:

$$\frac{v}{c} = \beta \ll 1$$

(это имеет смысл как с точки зрения размерности, так и по порядку величины). Тогда из второго уравнения (22) следует:

$$\psi^- \sim \beta \psi^+ \ll \psi^+. \quad (22a)$$

То же самое получается и из первого уравнения (22), если разность $W - V$ приравнять $\frac{mv^2}{2}$.

Итак, из двух функций, образующих полное решение, ψ^+ является «большой», а ψ^- — «малой». Последняя функция обращается в нуль при предельном переходе к уравнению Шредингера ($\beta \rightarrow 0$). Поэтому в полурелятивистском приближении, каковым является уравнение Паули, естественно ограничиться рассмотрением только $\psi^+ = \varphi$.

Как видно из наших рассуждений, уравнение (20) строго следует из дираковского; приближение начинается, когда мы переходим к упрощенному рассмотрению спиновых поправок. Ясно, однако, что без этих упрощений уравнение (20) слишком сложно и потому не удобно для сильно релятивистского случая. Наоборот, упрощенное уравнение Паули — именно потому, что при выводе его с самого начала пренебрегают «малой» функцией ψ^- — прекрасно подходит для приближенных полурелятивистских расчетов.

Вернемся теперь к телу, построенному на всех 16 элементах (1), и рассмотрим в общем виде образованные из этих единиц гиперкомплексные числа типа (3). Разделим их на два класса, соответственно тому, имеют

они обратные величины или нет. Числа первого класса будем называть *делителями*, числа второго класса — *делителями нуля*. На первые можно делить, на вторые — нельзя. *Определение делителя* A даётся формулой

$$AB = 1 \text{ или } BA = 1,$$

т. е. должно существовать такое число B , которое, будучи умножено слева или справа на A , даёт единицу. Можно написать также:

$$B = A^{-1}, \quad A = B^{-1}.$$

Очевидно, что 16 основных единиц являются делителями. Например, величиной, обратной γ_α , является γ_α , обратной $\gamma_{\alpha\beta}$ является — $\gamma_{\beta\alpha}$. Величина, обратная делителю, сама есть делитель. Из условия $AB = 1$ следует также, что

$$BA = 1.$$

Определение делителя нуля A_0 даётся формулой

$$A_0 B_0 = 0 \text{ или } B_0 A_0 = 0;$$

т. е. должно существовать число B_0 , которое, будучи умножено слева или справа на A_0 , даёт нуль. Естественно, при этом предполагается, что $A_0 \neq 0$, $B_0 \neq 0$. Делителем нуля является, например, величина

$$A_0 = 1 \pm \gamma_4, \quad (23)$$

как это непосредственно видно из уравнения (146). С некоторыми другими делителями нуля мы познакомились в предыдущем параграфе [мы имеем в виду величины G и G_- ; см. (4.14) и (4.15)]. Далее, можно указать ещё простую пару делителей нуля:

$$A_0 = 1 \pm i\gamma_{12}. \quad (24)$$

Делители нуля имеют для нас особое значение, так как они служат для *приведения* гиперкомплексных чисел. Под приведением мы понимаем превращение одного гиперкомплексного числа в другое, содержащее меньшее число основных единиц. Мы будем различать типы делителей нуля соответственно степени достигаемого с их помощью приведения. Степень приведения обозначим буквой r . Существуют делители нуля степени $1/2$ (уменьшающее вдвое число исходных единиц) и степени $1/4$. (Возможно также значение $r = 3/4$, но для нас этот случай несущественен.)

Оба делителя нуля (23) и (24) имеют степень $1/2$. Чтобы убедиться в этом для случая (23), запишем произвольное число A в следующем виде:

$$A = a_0 + a_1\gamma_1 + a_2\gamma_2 + a_3\gamma_3 + a_4\gamma_{12} + a_5\gamma_{23} + a_6\gamma_{31} + a_7\gamma_{123} + \\ + b_0\gamma_4 + b_1\gamma_{14} + b_2\gamma_{24} + b_3\gamma_{34} + b_4\gamma_{124} + b_5\gamma_{234} + b_6\gamma_{314} + b_7\gamma_{1234}. \quad (25)$$

Тогда, умножая отдельно каждую пару расположенных друг под другом слагаемых на $1 + \gamma_4$, легко видеть, что

$$A(1 + \gamma_4) = (c_0 + c_1\gamma_1 + c_2\gamma_2 + \dots + c_7\gamma_{123})(1 + \gamma_4), \quad c_k = a_k + b_k. \quad (25a)$$

Таким образом, после умножения на $1 + \gamma_4$ из 16 единиц остались только восемь — те, которые не содержат индекса 4. Так же обстоит дело и для делителя нуля (24). В этом случае запишем произвольное число A в виде

$$A = a_0 + a_1\gamma_1 + a_2\gamma_2 + a_3\gamma_3 + a_4\gamma_4 + a_5\gamma_{12} + a_6\gamma_{14} + a_7\gamma_{24} + \\ + i(b_6\gamma_{123} + b_1\gamma_{12} + b_2\gamma_{312} + b_3\gamma_{412} + b_4\gamma_{23} + b_5\gamma_{24} + b_6\gamma_{3412} + b_7\gamma_{314}) \quad (26)$$

(так что множители при b_k получаются из множителей при соответствующих a_k умножением на $i\gamma_{12}$). Как и в предыдущем примере, мы получаем:

$$A(1 + i\gamma_{12}) = (c_0 + c_1\gamma_1 + c_2\gamma_3 + \dots + c_7\gamma_{234})(1 + i\gamma_{12}), \quad c_k = a_k + b_k. \quad (26a)$$

К тому же типу относится и делитель нуля G (4.14). Чтобы убедиться в этом, запишем G в виде:

$$G = k_0(\gamma' - 1), \quad \gamma' = i \sum_{\beta=1}^4 \gamma_\beta \frac{k_\beta}{k_0}. \quad (26b)$$

Из (4.8a) немедленно следует, что $\gamma'^2 = 1$. Поэтому при приведении G действует совершенно так же, как делитель нуля (23), т. е. имеет степень $1/2$.

Делитель нуля степени $1/4$ можно получить, перемножая друг с другом два подходящим образом выбранных делителя нуля степени $1/2$. Слова «подходящим образом выбранных» означают, что сомножители должны коммутировать друг с другом и быть линейно независимыми — только тогда каждый из них сможет в полной мере осуществить своё «приводящее» действие. Условия перестановочности и линейной независимости выполняются, в частности, в двух следующих примерах:

$$(1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4) \quad (27a)$$

или

$$(1 + i\gamma_{12})(1 + i\gamma_{34}). \quad (27b)$$

Очевидно, при умножении на делитель нуля степени $r = 1/4$ исходная 16-членная группа превращается в группу кватернионов, а при $r = 1/2$ — в группу бикватернионов. Например, при умножении на (27a) первый сомножитель, согласно уравнению (26a), превращает 16-членную группу в восьмичленную; затем при умножении на $1 + \gamma_4$ исчезают все единицы γ , содержащие индекс 4 [как в (25a)]. В результате остаются только члены с

$$1, \gamma_1, \gamma_3, \gamma_{13}. \quad (28)$$

Получающаяся таким образом группа изоморфна группе кватернионов, как это уже отмечалось в связи с (6).

Применим теперь делитель нуля степени $1/4$ дважды: один раз справа, другой раз слева. При этом число основных единиц уменьшается в 16 раз, т. е. мы придём к обычным комплексным числам. Чтобы пояснить это, обозначим через Γ_1 и Γ_2 соответствующие делители нуля, через A — гиперкомплексное число типа (3), через a — обычное комплексное число и рассмотрим следующий пример:

$$\Gamma_2 A \Gamma_1 = \Gamma_2 a \Gamma_1 = a \Gamma', \quad \Gamma' = \Gamma_1 \Gamma_2. \quad (29)$$

Множитель Γ' здесь зависит от выбора делителей нуля Γ_1 и Γ_2 , но не зависит от частных свойств данного гиперкомплексного числа A . Пусть мы имеем последовательность подлежащих приведению чисел A_1, A_2, \dots ; тогда их приведённые представления суть $a_1 \Gamma', a_2 \Gamma' \dots$, и отношения между последними величинами ($a_1 : a_2 : \dots$) не зависят от γ . Это обстоятельство и используется для физического истолкования чисел $A_1, A_2 \dots$. Таким образом, мы получаем общую схему вычислений, необходимых для приведения и физического истолкования любых гиперкомплексных чисел или функций: нужно умножить данное число слева и справа на делители нуля степени $1/4$ (Γ_1 и Γ_2); тогда исследуемые величины будут приведены к виду, допускающему их сравнение друг с другом и физическое истолкование.

Оказывается удобным (например, в силу требования вещественности) выбрать Γ_1 и Γ_2 сопряжёнными друг с другом, т. е. положить:

$$\Gamma_2 = \bar{\Gamma}, \quad \Gamma_1 = \Gamma. \quad (29a)$$

Тогда $\Gamma' = \bar{\Gamma}\Gamma$. Если, в частности, взять самосопряжённые делители нуля, то просто

$$\Gamma_2 = \Gamma_1 = \Gamma, \quad \Gamma' = \Gamma^2. \quad (29б)$$

Именно так обстоит дело, например, в случае (27а). Действительно, по общим правилам (3.10а, б)

$$\bar{\Gamma} = (1 + \gamma_4)(1 - i\gamma_{34}).$$

Но эта величина совпадает с Γ , так как сомножители здесь перестановочны (см. выше), а $\gamma_{34} = -\gamma_{43}$. С другой стороны, делитель нуля (27б) не является самосопряжённым. Напротив, в силу (3.10а) и (3.10б) мы имеем в этом случае:

$$\bar{\Gamma} = (1 - i\gamma_{34})(1 + i\gamma_{12}),$$

а эта величина, хотя сомножители в ней и перестановочны, отлична от (27б).

В дальнейшем мы будем пользоваться преимущественно делителем нуля (27а), предварительно «пронормировав его на единицу». Под этим мы разумеем следующее условие [см. (29б)]:

$$\Gamma^2 = \Gamma' = \Gamma. \quad (29в)$$

Последнего легко добиться, вводя в определение (27а) численный множитель q , т. е. полагая

$$\Gamma = q(1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4).$$

Отсюда

$$\Gamma^2 = q^2(1 + i\gamma_{12})^2(1 + \gamma_4)^2 = q^2 2(1 + i\gamma_{12}) \cdot 2(1 + \gamma_4) = 4q^2\Gamma.$$

Условие (29б) означает:

$$4q^2 = q; \quad q = \frac{1}{4}.$$

Таким образом, наш делитель нуля принимает вид:

$$\Gamma = \frac{1}{4}(1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4). \quad (30)$$

Это выражение обладает следующими свойствами:

а) сомножители в нём коммутируют друг с другом; действительно, помимо (30) мы имеем также

$$\Gamma = \frac{1}{4}(1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12}); \quad (30a)$$

б) делитель нуля (30) является самосопряжённым:

$$\bar{\Gamma} = \Gamma; \quad (30б)$$

в) величина (30) нормирована на единицу:

$$\Gamma^2 = \Gamma. \quad (30в)$$

Рассмотрим теперь выражение вида

$$v\Gamma u, \quad (31)$$

где v и u — пара сопряжённых друг с другом волновых функций, принадлежащих одному и тому же состоянию, Π — произведение единиц γ или вообще какое-нибудь выражение типа (3). Будем считать выражение Π самосопряжённым в смысле правил (3.10а, б). Это предположение справедливо, например, в случае плотности ρ , когда $\Pi = \gamma_4$. Точно так же обстоит дело и для вектора тока j , когда в соответствии с (3.6) и (3.14) $\Pi = ic\gamma$. Равным образом и магнитный момент электрона изображается самосопряжённым оператором, именно:

$$\Pi = \mu\sigma, \quad \sigma_1 = -i\gamma_{23}, \dots$$

Действительно [см. (2.13)],

$$\bar{\sigma}_1 = +i\gamma_{32} = \tau_1.$$

Заметим, что наше требование самосопряжённости задним числом оправдывает введение множителя i в определение оператора σ и вектора тока j . Приведём теперь выражение (31), умножая его справа и слева на делители нуля (29а):

$$\bar{\Gamma}v\Pi u\Gamma = a\bar{\Gamma}\Gamma. \quad (32)$$

Нетрудно показать, что число a , получающееся в результате приведения, *вещественно*. В самом деле, в силу наших предположений о Π , u и v , левая часть (32) является самосопряжённой; то же, следовательно, относится и к правой части. Поскольку $\bar{\Gamma}\Gamma$ представляет собой самосопряжённое выражение, таковым же должно быть и число a . Но последнее не содержит величин γ , оно не должно меняться при замене $+i$ на $-i$. Это означает, что a — *вещественное число*.

Подтвердим этот вывод конкретным расчётом для случая оператора плотности $\Pi = \gamma_4$. В качестве Γ выберем выражение (30); тогда, в силу (30б, в), $\bar{\Gamma}\Gamma = \Gamma$.

Для начала мы можем считать функцию u записанной в 16-членной форме (10). Умножая её справа на Γ , получим [см. (28)] четырёхчленное выражение:

$$u\Gamma = (u_0 + u_1\gamma_1 + u_2\gamma_3 + u_3\gamma_{31})\Gamma. \quad (33)$$

Равным образом находим, умножая v на Γ слева:

$$\Gamma v = \Gamma(v_0 - v_1\gamma_1 - v_2\gamma_3 + v_3\gamma_{13}). \quad (34)$$

Знаки здесь выбраны так, чтобы выполнялись правила перехода к сопряжённому выражению (3.10а, б); при этом функции v_i комплексно сопряжены с соответствующими u_i в (33).

Вычислим теперь для данного случая выражение (32) ($\Pi = \gamma_4$). Мы имеем:

$$\begin{aligned} (v_0 - v_1\gamma_1 - v_2\gamma_3 + v_3\gamma_{13})\gamma_4(u_0 + u_1\gamma_1 + u_2\gamma_3 + u_3\gamma_{31}) = \\ = (v_0 + v_1\gamma_1 + v_2\gamma_3 + v_3\gamma_{13})(u_0 + u_1\gamma_1 + u_2\gamma_3 + u_3\gamma_{13}). \end{aligned} \quad (35)$$

Во второй строке величина γ_4 перенесена налево (в результате чего изменились знаки у γ_1 и γ_3 , но не у γ_{13}) и затем опущена, ибо её можно считать включённой в множитель $(1 + \gamma_4)$ в Γ . При раскрытии скобок в правой части (35) появятся, в частности, слагаемые, содержащие γ_1 , γ_3 и γ_{13} . Будучи умножены слева и справа на Γ , они обращаются в нуль [см. дальше формулы (43а, б)], и остаётся только не зависящий от γ член, содержащий

квадраты $\gamma_1^2 = \gamma_2^2 = -\gamma_3^2 = 1$. Обозначим его посредством a_p (приведённая часть, соответствующая плотности ρ). Мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} \rho &= a_p \Gamma^3 = a_p \Gamma, \\ a_p &= v_0 u_0 + v_1 u_1 + v_2 u_2 + v_3 u_3. \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Это выражение является не только *вещественным*, но (поскольку $v_i = u_i^*$) также и *положительно-определённым* (точнее, «полуопределённым», т. е. $\rho \geq 0$). Оно представляет собой естественное обобщение определения плотности в нерелятивистской теории Шредингера ($\rho = u^* u$) и отличается от соответствующего определения для релятивистского уравнения Шредингера (1.23) своим положительно-определённым характером. В первоначальном изложении Дирака положительно-определённый характер и четырёхчленная форма (36) выражения для плотности являлись исходным постулатом. Заметим ещё, что нашим доказательством положительной определённости формы (36) задним числом оправдываются многократно упоминавшиеся правила (10а, б), введённые в § 3 без должного обоснования — просто как некоторые разумные условия.

Для других самосопряжённых операторов Π результаты приведения хотя и остаются вещественными, но, вообще говоря, не являются положительно-определёнными. Покажем это на примере оператора тока $\Pi = ic\gamma$. Чтобы вычислить x -компоненту (j_1) вектора тока, нужно в первой строчке (35) заменить γ_4 на γ_1 . Включая γ_1 в левый сомножитель, мы приведём последний к виду:

$$-v_1 + v_0 \gamma_1 - v_3 \gamma_3 + v_2 \gamma_{13}.$$

Таким образом, во второй строчке (35) следует заменить v_0, v_1, v_2, v_3 соответственно на $-v_1, v_0, -v_3, v_2$.

Далее следует ещё ввести множитель ic . В результате вместо (36) мы получим:

$$\left. \begin{aligned} j_1 &= ica_1 \Gamma, \\ a_1 &= (v_0 u_1 - v_1 u_0) + (v_2 u_2 - v_3 u_3). \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Поскольку $v_i = u_i^*$, выражения в круглых скобках здесь являются чисто мнимыми и, следовательно, j_1 *вещественно* (с точностью до «множителя приведения» Γ).

Для вычисления y -компоненты вектора тока (j_2) γ_4 в (35) следует заменить на γ_2 (последнюю величину удобнее записать в виде $i\gamma_{12} \cdot i\gamma_1$). Величину $i\gamma_{12}$ мы перенесём налево (при этом у некоторых v_i изменяются внаки) и включим её в содержащийся в Γ множитель $1 + i\gamma_{12}$. Дальнейшие вычисления протекают так же, как и в случае j_1 , и мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} j_2 &= -ca_2 \Gamma, \\ a_2 &= (v_0 u_1 + v_1 u_0) + (v_2 u_3 + v_3 u_2). \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

Поскольку $v_i = u_i^*$, выражения в круглых скобках здесь *вещественны*, и *вещественным* является j_2 (с точностью до множителя Γ).

Составляющая вектора тока по оси z (j_3) вычисляется так же, как и j_1 , с заменой γ_1 на γ_3 . Мы получаем при этом:

$$\left. \begin{aligned} j_3 &= ica_3 \Gamma, \\ a_3 &= (v_0 u_2 - v_2 u_0) - (v_1 u_3 - v_3 u_1). \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

Как и при вычислении J_1 , выражения в круглых скобках оказываются чисто мнимыми, и, следовательно, J_2 с точностью до множителя Γ является вещественным.

Конкретный вид полученных нами вещественных выражений (37), (38), (39) зависит от специального выбора Γ : если вместо (30) использовать какой-нибудь другой делитель нуля, то вещественные и чисто мнимые комбинации из функций u_i и v_i образуются иным путём. С другой стороны, формула для плотности (36) не зависит от частного вида избранного нами делителя нуля. Из формул (37), (38), (39) ясно видно также, что компоненты вектора тока не являются положительно-определёнными.

В математической литературе наши гиперкомплексные единицы известны под названием *чисел Клиффорда*. Действительно, ещё в 1878 г. гениальный, рано умерший англичанин Клиффорд ввёл их в связи с некоторыми алгебраическими-геометрическими вопросами и исследовал их методами теории групп в общем виде (n единиц вместо четырёх)¹⁾. К изучению уравнения Дирака они были впервые применены в работах Темпла и Эддингтона²⁾. Изложенный выше метод приведения с помощью подходящих делителей нуля был разработан Заутером³⁾ и успешно применён им в ряде задач релятивистской волновой механики. Глубокое систематическое обоснование этого метода было дано Францем⁴⁾.

С другой стороны, как сам Дирак, так и большинство его последователей⁵⁾ пользовались, казалось бы, совершенно отличными от наших методами матричного исчисления. С матричным методом мы познакомились в § 5 гл. III. Однако там мы имели дело с бесконечными матрицами, заменявшими непрерывные переменные уравнения Шредингера; здесь же речь идёт о четырёхрядных квадратных матрицах, изображающих различные возможные спиновые состояния. В данном случае правило умножения матриц также даёт характерной для теории детерминантов формулой (III.5.3). Можно указать целый ряд способов выбора четырёх четырёхрядных квадратных матриц, удовлетворяющих соотношениям (2.2). Таким путём получаются, в сущности, излишне специализированные и не очень наглядные, но зато конкретные представления наших абстрактных величин γ . Произведения их также будут четырёхрядными матрицами. В дополнении 13 мы построим такие матрицы, которые будут образованы только из чисел $0, \pm 1, \pm i$. Поскольку большинство их элементов будет равно нулю, перемножение таких матриц не представит особых трудностей. Но всё же оно требует гораздо большего внимания и напряжения памяти, чем наш общий метод вычислений с величинами γ . Особенно простым оказывается матричное представление делителей нуля (см. конец приложения 13): делитель нуля степени $r = 1/2$ изображается матрицей, у которой лишь два элемента отличны от нуля; делитель нуля степени $1/4$ — матрицей с только одним не равным нулю элементом.

Равным образом и волновые функции u и v можно представить себе в виде четырёхрядных квадратных матриц. Последние образуются из 16, вообще говоря, отличных от нуля функций, соответствующих коэффициентам u_0, u_1, \dots, u_{15} в нашем гиперкомплексном представлении. Если, однако, помножить эту матрицу общего вида справа на делитель нуля степени $1/4$, то все

1) Enc. d. Math. Wiss, т. I (Art Stady), стр. 165 и 180.

2) G. Temple, Proc. Roy. A Soc. 127, 339, 349 (1930); A. S. Eddington, Proc. Roy. Soc. A. 121 (1928).

3) F. Sauter, Zs. f. Phys. 63, 803 (1930); 64, 295 (1930).

4) W. Franz, Münchener Akademie, ноябрь 1935.

5) См., например, прекрасную книгу де Бройля «Магнитный электрон», ДНТВУ, 1933.

матричные элементы, за исключением стоящих в одном определённом столбце, обратятся в нуль (при умножении на делитель нуля слева отличные от нуля матричные элементы остаются только в одной строке). Тем самым 16 функций u_0, \dots, u_{15} сводятся к четырём: u_1, \dots, u_4 . Именно о них и идёт речь при обычном изложении теории Дирака. Дифференциальное выражение Дирака $\vec{L}u$ (или сопряжённое с ним, $\overline{\psi}M$) также можно привести с помощью делителя степени $r=1/4$. При этом также получается матрица, в которой лишь четыре элемента не равны нулю. Именно поэтому в обычном изложении теории Дирака и говорят о четырёх уравнениях, которым должны удовлетворять четыре функции: u_1, \dots, u_4 (или соответственно ψ_1, \dots, ψ_4). С нашей точки зрения, однако, такой метод является в значительной степени специальным. Общее положение вещей представляется гораздо более ясным, если пользоваться *одним* дифференциальным уравнением, содержащим величины γ, u , следовательно, *одной* волновой функцией такого же типа.

Добавление:

о приведённом изображении плоской волны

Испробуем прежде всего наш метод приведения на задаче о нормировке плоской волны, не доведенной до конца в предыдущих параграфах. Речь идёт о том, чтобы удовлетворить уравнению (4.25). Выберем в качестве Γ уже использованный нами делитель нуля (30) и попробуем положить:

$$F = \bar{F} = N\Gamma, \quad (40)$$

где N — вещественный нормирующий множитель, который ещё надо определить. Тогда уравнение (4.25) принимает вид:

$$-2 \frac{EV}{\hbar c} N^2 \Gamma G \Gamma = \Gamma. \quad (41)$$

Теперь нам предстоит в явном виде привести выражение

$$\Gamma G \Gamma = \frac{1}{4} (1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4) \left\{ i \sum \gamma_\alpha k_\alpha - k_0 \right\} \frac{1}{4} (1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4). \quad (42)$$

Заметим, прежде всего, что слагаемые, соответствующие $\alpha = 1, 2, 3$, выпадают при перемножении. Так, например, мы получаем, перенося множитель $(1 + i\gamma_{12})$ слева направо:

$$(1 + i\gamma_{12})\gamma_1 = \gamma_1(1 - i\gamma_{12}). \quad (43a)$$

Умножая (43a) на стоящее справа выражение $1 + i\gamma_{12}$, находим:

$$(1 - i\gamma_{12})(1 + i\gamma_{12}) = 0. \quad (43b)$$

Равным образом обращаются в нуль и слагаемые с γ_2 и γ_3 (в последнем случае следует переносить направо не $1 + i\gamma_{12}$, а $1 + \gamma_4$). В результате из всей суммы в G остаются только члены

$$i\gamma_4 k_4 - k_0.$$

Поскольку $(1 + \gamma_4)\gamma_4 = 1 + \gamma_4$, это можно переписать в более простом виде:

$$ik_4 - k_0.$$

Таким образом, окончательно получается:

$$\Gamma G \Gamma = (ik_4 - k_0)\Gamma^2 = (ik_4 - k_0)\Gamma. \quad (44)$$

На этом примере видно, в частности, как в результате совместного действия (слева и справа) делителей нуля степени $1/4$ гиперкомплексное число G приводится к обычному числу $a = ik_4 - k_0$. Подставляя теперь (44) в (41) и пользуясь значениями k_4 и k_0 из (4.8), находим условие нормировки:

$$-2 \frac{EV}{\hbar c} N^2 \left(\frac{-E - E_0}{\hbar c} \right) \Gamma = \Gamma.$$

Оно удовлетворяется, если

$$N = \frac{\hbar c}{\sqrt{2VE(E + E_0)}}. \quad (44a)$$

Таким образом, на основании (40) мы имеем:

$$F = \bar{F} = \frac{\hbar c \Gamma}{\sqrt{2VE(E + E_0)}}, \quad \Gamma = \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}). \quad (44b)$$

Только теперь волновые функции u (4.10) и v (4.12) становятся определённым образом нормированными. В явной форме они записываются так:

$$\left. \begin{aligned} u &= \frac{\hbar c}{\sqrt{2VE(E + E_0)}} \left(i \sum \gamma_a k_a - k_0 \right) e^{i \sum k_a x_a} \cdot \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}), \\ v &= \frac{\hbar c}{\sqrt{2VE(E + E_0)}} \cdot \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}) \left(i \sum \gamma_a k_a - k_0 \right) e^{-i \sum k_a x_a}. \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Обсудим теперь, в какой мере вид этих собственных функций зависит от выбора данного делителя нуля Γ . Очевидно, самый общий делитель нуля, какой только можно использовать для приведения функции u , получится из (30) умножением на произвольное гиперкомплексное число типа (3). Таким образом, надо исследовать выражение [ясно, что достаточно выписать из (45) только зависящие от γ сомножители G и Γ]:

$$G(a_0 + a_1 \gamma_1 + \dots + a_{15} \gamma_{1234}) \Gamma.$$

Как мы знаем, G и Γ представляют собой делители нуля степени соответственно $1/2$ [см. (26б)] и $1/4$. Следовательно, в результате их действия от 16 параметров a существенными остаются только

$$\frac{16}{2 \cdot 4} = 2.$$

Один из них выпадает ещё благодаря условию нормировки. Таким образом, остаётся только однопараметрическое семейство решений. Иначе говоря, это означает, что помимо (45) имеется ещё другое линейно независимое решение; отношение мультипликативных постоянных, на которые можно помножить наши решения при составлении их линейной комбинации и является (поскольку произвольным) параметром семейства. Упомянутое второе решение получится, если в обеих формулах (45) заменить $1 + \gamma_4$ на $i\gamma_{12}(1 + \gamma_4)$. Оно также нормировано и, как легко убедиться, ортогонально к (45).

Будем различать эти два решения уравнения Дирака для свободного электрона с помощью нижнего индекса $\lambda = 1, 2$. Именно, вместо u и v будем писать u_λ, v_λ ; вместо прежних FG и GF будем писать Γ_λ и $\bar{\Gamma}_\lambda$. Вместо (4.10) и (4.12) мы получим:

$$u_\lambda = \Gamma_\lambda e^{i \sum k_a x_a}, \quad v_\lambda = \bar{\Gamma}_\lambda e^{-i \sum k_a x_a}. \quad (46)$$

Подчёркнём, что в обоих (отличающихся индексом λ) состояниях зависимость волновых функций от координат оказывается одной и той же. Различие

состоит только в множителе Γ и описывает, как мы увидим позднее (§ 12), зависимость волновых функций от *спина*. В силу нормировки и ортогональности функций μ_λ , ν_λ , мы имеем:

$$\bar{\Gamma}_\lambda \cdot \gamma_\lambda \Gamma_\lambda = \delta_{\lambda, \lambda} \Gamma. \quad (47)$$

Следовательно, уравнение (4.22) при $\beta = 4$ принимает вид:

$$ik_4 \bar{\Gamma}_\lambda \Gamma_\lambda = -k_0 \bar{\Gamma}_\lambda \cdot \gamma_\lambda \Gamma_\lambda = -k_0 \delta_{\lambda, \lambda} \Gamma,$$

откуда, подставляя значения $k_4 = \frac{iE}{\hbar c}$ и $k_0 = \frac{E_0}{\hbar c}$, уравнение (4.8), находим:

$$\bar{\Gamma}_\lambda \cdot \Gamma'_\lambda = \frac{E_0}{E} \delta_{\lambda, \lambda} \Gamma. \quad (48)$$

В то же время при $\beta = 1, 2, 3$ мы получаем из (4.22):

$$\not{k} \bar{\Gamma}_\lambda \cdot \Gamma_\lambda = -k_0 \Gamma_\lambda \cdot \gamma \Gamma_\lambda = -\frac{E_0}{\hbar c} \bar{\Gamma}_\lambda \cdot \gamma \Gamma_\lambda,$$

т. е. с учётом (48)

$$\bar{\Gamma}_\lambda \cdot \gamma \Gamma_\lambda = -i \frac{\hbar c \not{k}}{E} \delta_{\lambda, \lambda} \Gamma = -i \frac{v}{c} \delta_{\lambda, \lambda} \Gamma \quad (49)$$

(в последнем преобразовании импульс \not{k} был заменён на mv , а энергия E - на mc^2).

Формулы (47), (48), (49) показывают, как приводятся величины $1, \gamma, \dots, \gamma_4$ при умножении слева и справа на $\bar{\Gamma}_\lambda$ и Γ_λ . Естественно поставить вопрос о возможности аналогичного приведения более сложных произведений величин γ , например $\Pi = \gamma_{12}, \dots, \gamma_{13}, \dots, \gamma_{1234}$.

Ответ, вообще говоря, оказывается отрицательным; однако справедлива следующая, важная для дальнейшего теорема:

$$\sum_{\lambda=1}^2 \bar{\Gamma}_\lambda \Pi \Gamma_\lambda = 0. \quad (50)$$

В словесной формулировке она гласит: приведённое значение любого произведения двух и более величин γ обращается в нуль, будучи просуммировано по обеим ориентациям спина ($\lambda = 1, 2$).

Для доказательства удобно прежде всего направить одну из координатных осей (например, ось z) параллельно волновому вектору k . Тогда в уравнении Дирака не будет членов с γ_1 и γ_3 (так как $k_1 = k_3 = 0$), и, следовательно, оно не изменится при перемене знака у γ_1 или γ_3 . Равным образом и левая часть (50) инвариантна относительно изменения знака, например, у γ_1 , так как на значении симметрично составленной суммы по $\lambda = 1, 2$ не сказывается, какое именно предпочтительное направление спина обусловлено специальным выбором Γ_λ . Следовательно,

$$\sum_{\lambda=1}^2 \bar{\Gamma}_\lambda \Pi \Gamma_\lambda = \sum_{\lambda=1}^2 \bar{\Gamma}_\lambda \Pi' \Gamma_\lambda, \quad (51)$$

где Π' получается из Π изменением знака у γ_1 (при неизменных γ_2, γ_3 и γ_4). Если, с другой стороны, в произведении Π содержится γ_1 , то $\Pi' = -\Pi$ и из (51) немедленно вытекает (50). То же самое получается, если Π' содержит множитель γ_3 и рассматриваемое преобразование состоит в изменении знака у γ_3 при неизменных γ_1, γ_2 и γ_4 . Заметим, что наши выводы сохраняют

силу и в специальных случаях $\Pi = \gamma_1$ и $\Pi = \gamma_2$ и при этом отнюдь не противоречат формуле (49). Действительно, при нашем выборе системы координат составляющие вектора k по осям x и y равны нулю.

Таким образом, справедливость соотношения (50) доказана для всех случаев, когда Π содержит в качестве множителя γ_1 или γ_2 , т. е. для всех произведений, кроме $\Pi = \gamma_3 \gamma_4$. В этом последнем случае наш метод доказательства неприменим, так как γ_3 и γ_4 входят в уравнение Дирака и, следовательно, оно (а потому и Γ_λ) не инвариантно относительно изменения знака у γ_3 или γ_4 . Однако именно в этом случае выполняется ещё более сильное условие, чем (50): для каждого отдельного значения λ

$$\bar{\Gamma}_\lambda \gamma_3 \gamma_4 \Gamma_\lambda = 0. \quad (52)$$

Соотношение (52) можно доказать, рассматривая два сопряжённых уравнения Дирака¹⁾:

$$(i\gamma_3 k + i\gamma_4 k_4 + k_0) \Gamma_\lambda = 0,$$

$$\bar{\Gamma}_\lambda (i\gamma_3 k + i\gamma_4 k_4 + k_0) = 0.$$

Действительно, умножая первое из них слева на $\bar{\Gamma}_\lambda \gamma_4$, второе — справа на $\gamma_4 \Gamma_\lambda$ и вычитая почленно, приходим к (52).

§ 6. ИНВАРИАНТНОСТЬ ОТНОСИТЕЛЬНО ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ЛОРЕНЦА

Ясно выраженная цель теории Дирака состояла в релятивистски инвариантной формулировке волновой механики. Мы покажем сейчас, что эта цель действительно достигнута.

В соответствии с (2.39) запишем уравнение Дирака в сокращённом виде:

$$(\gamma_\alpha p_\alpha + p_0) u = 0. \quad (1)$$

Сделаем несколько замечаний для пояснения этой формы записи.

1) Мы отбросили специальный знак суммирования по α , пользуясь правилом Эйнштейна, согласно которому суммирование по дважды встречающемуся индексу всегда подразумевается. (В нашем случае α принимает значения от 1 до 4.) Это правило будет применяться во всех формулах настоящего параграфа.

2) «Элементарный импульс»

$$p_\alpha = \frac{e}{c} \Phi_\alpha, \quad (2)$$

входящий в (2.38 б), заменён здесь просто на

$$p_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \quad (\text{«канонический импульс»}). \quad (3)$$

Действительно, при преобразовании координат обе эти величины преобразуются одинаковым образом: как p_α , так и четырёхмерный потенциал $\Phi_\alpha = (A, i\varphi)$ представляют собой четырёхмерные векторы. Поэтому, интере-

¹⁾ Эти уравнения получаются из (4.21), если отбросить несущественную в данном случае координатную часть функций u и v и учесть, что в выбранной нами системе координат $k_1 = k_2 = 0$.

суюсь только трансформационными свойствами, можно писать для краткости просто p_α ¹⁾.

3) Наконец, мы ввели обозначение p_0 для фигурирующей в (2.39) величины $\pm im_0c$; в отличие от p_α p_0 является инвариантом.

Уравнение (1) записано в некоторой исходной координатной системе:

$$x_\alpha = x_1, x_2, x_3, x_4 = ict.$$

Введём теперь другую систему координат с помощью ортогонального преобразования:

$$x'_3 = a_{\beta\alpha} x_\alpha. \quad (4)$$

Соотношение (4) представляет собой преобразование Лоренца общего вида. Его коэффициенты $a_{\beta\alpha}$ удовлетворяют четырёхмерным условиям ортогональности:

$$a_{\beta\alpha} a_{\gamma\alpha} = a_{\alpha\beta} a_{\alpha\gamma} = \delta_{\beta\gamma}, \quad (5)$$

где $\delta_{\beta\gamma}$ — обычный δ -символ (ноль или единица).

Из (5) немедленно следует, что преобразование, обратное (4), имеет вид:

$$x_\alpha = a_{\gamma\alpha} x'_\gamma \quad (6)$$

[в (6) суммирование идёт по γ , а в (4) и (5) — по α].

По определению четырёхмерного вектора импульс p_α преобразуется так же, как и x_α . Таким образом, мы имеем:

$$p'_3 = a_{\beta\alpha} p_\alpha, \quad (7)$$

$$p_\alpha = a_{\nu\alpha} p'_\nu. \quad (7a)$$

(В последней формуле мы намеренно не употребили индекса γ , чтобы избежать смешения его с гиперкомплексными единицами γ , которые сейчас появятся.) Подставляя (7a) в (1), получаем:

$$(\gamma_\alpha a_{\nu\alpha} p'_\nu + p_0) u = 0. \quad (8)$$

С другой стороны, уравнение Дирака в штрихованной системе имеет вид [мы снабжаем штрихами все величины, кроме p_0 , ибо последняя является инвариантом (см. выше), и пишем индекс ν вместо α]:

$$(\gamma'_\nu p'_\nu + p_0) u' = 0. \quad (9)$$

Требование инвариантности означает, что левые части уравнений (8) и (9) должны совпадать друг с другом. Этого можно добиться двояким образом:

А) *Первая точка зрения.* Положим:

$$u' = u. \quad (10)$$

Тогда, сравнивая (8) и (9), находим:

$$\gamma'_\nu = a_{\nu\alpha} \gamma_\alpha. \quad (11)$$

Таким образом, величины γ преобразуются как составляющие четырёхмерного вектора [см. (4)]; волновая функция инвариантна.

¹⁾ Вместо p_α можно было бы воспользоваться и прежним обозначением Ω_α (2.5), которое отличается от (2) только множителем $\frac{i}{\hbar}$. Сопряжённая величина \overleftarrow{p}_α (см. формулу II на стр. 224) с точностью до того же множителя будет совпадать с Ω'_α (2.4).

Б) *Вторая точка зрения.* Положим:

$$\gamma' = \gamma. \quad (12)$$

а волновую функцию u преобразуем с помощью подстановки

$$u' = Tu, \quad (13)$$

где символ T зависит не только от α , но и от величин γ . Подставляя (12) и (13) в (9) и применяя к полученному выражению слева обратное преобразование T^{-1} , находим:

$$\{T^{-1}\gamma_\nu T p'_\nu + p\} u = 0. \quad (14)$$

(Было использовано то обстоятельство, что p'_ν и p_0 не зависят от γ и потому коммутируют с T ; далее $T^{-1}T = 1$.)

Сравнивая (14) и (8), получаем следующее условие для определения T :

$$\gamma_\alpha a_{\nu\alpha} = T^{-1}\gamma_\nu T. \quad (15)$$

А. Встанем пока на первую точку зрения, которая выглядит более естественной. Мы должны доказать, что величины γ' , определённые формулой (11), обладают теми же свойствами, что и величины γ в исходной системе координат, т. е. что γ' антикоммутируют друг с другом, а квадраты их равны единице. Итак, мы утверждаем:

$$\gamma'_\mu \gamma'_\nu + \gamma'_\nu \gamma'_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (16)$$

Для доказательства перепишем левую часть (16) с помощью (11):

$$a_{\mu\alpha} \gamma_\alpha a_{\nu\beta} \gamma_\beta + a_{\nu\alpha} \gamma_\alpha a_{\mu\beta} \gamma_\beta = \gamma_\alpha \gamma_\beta (a_{\mu\alpha} a_{\nu\beta} + a_{\nu\alpha} a_{\mu\beta}).$$

Здесь индексы μ и ν фиксированы, по α и β выполняется суммирование. Поскольку безразлично, как именно обозначать индексы суммирования, мы можем поменять местами α и β ; выражение в круглых скобках при этом не изменится. Таким образом, правую часть можно переписать в виде:

$$\frac{1}{2} (\gamma_\alpha \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma_\alpha) (a_{\mu\alpha} a_{\nu\beta} + a_{\nu\alpha} a_{\mu\beta}).$$

При $\beta \neq \alpha$ первый сомножитель здесь обращается в нуль, поэтому остаются только слагаемые с $\beta = \alpha$. Для них мы получаем, учитывая условие ортогональности (5) и соотношение $\gamma_\alpha^2 = 1$:

$$a_{\mu\alpha} a_{\nu\alpha} + a_{\nu\alpha} a_{\mu\alpha} = \delta_{\mu\nu} + \delta_{\nu\mu} = 2\delta_{\mu\nu}.$$

Но это — не что иное, как правая часть уравнения (16), справедливость которого, таким образом, доказана. Итак, γ' — такие же гиперкомплексные единицы, как и γ . Далее, нужно объяснить, как надлежит понимать соотношение (10): $u = u'$. Очевидно, в него вкладывается следующий смысл: u представляет собой заданную функцию x и γ , u' — искомую функцию x' и γ' . Чтобы получить последнюю из первой, надо в соответствии с (6) и (11) заменить x на x' и γ — на γ' , т. е. положить:

$$u(\gamma, x) = u(a_{\mu\alpha} \gamma'_\mu, a_{\nu\beta} x'_\nu).$$

Последнее выражение, рассматриваемое как функция γ' , x' , и есть $u'(\gamma', x')$. Тогда тождество $u = u'$ выполняется для всех значений γ , x и для всех преобразованных (по Лоренцу) величин γ' , x' .

С инвариантностью u и векторным характером γ непосредственно связано доказательство того факта, что введённый в § 3 «четырёхмерный вектор тока» при преобразованиях Лоренца действительно ведёт себя как вектор.

Положим в соответствии с (3.6):

$$S_\alpha = v \gamma_\alpha u. \quad (17)$$

В «штрихованной» (преобразованной) системе будет:

$$S'_\alpha = v \gamma'_\alpha u. \quad (17a)$$

На основании (11) мы имеем:

$$\gamma'_\alpha = a_{\alpha\beta} \gamma_\beta,$$

откуда

$$S'_\alpha = a_{\alpha\beta} v \gamma_\beta u = a_{\alpha\beta} S_\beta.$$

В силу (4) это есть не что иное, как закон преобразования четырёхмерного вектора.

Осталось только показать, что из инвариантности u следует и инвариантность сопряжённой волновой функции v [что молчаливо и предполагалось в (17a)]. Для этого напишем сопряжённое уравнение Дирака $(v \overleftarrow{M}) = 0$ [см. (3.5), (3.4) и примечание на стр. 220]:

$$v (\overleftarrow{p}_\alpha \gamma_\alpha + p_0) = 0, \quad \overleftarrow{p}_\alpha = -\frac{\hbar}{i} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x_\alpha} - \frac{e}{c} \Phi_\alpha. \quad (18)$$

Здесь \overleftarrow{p}_α , как и p_α , является четырёхмерным вектором, т. е. преобразуется по формуле (7a), а p_0 , как и раньше, представляет собой инвариант $\pm im_0 c$. Таким образом, уравнение (18) идентично следующему:

$$v (a_{\alpha\beta} \overleftarrow{p}'_\beta \gamma_\alpha + p_0) = 0. \quad (18a)$$

Сравним это с сопряжённым уравнением Дирака в штрихованной системе, написав последнее по аналогии с (9) в виде:

$$v' (\overleftarrow{p}'_\alpha \gamma'_\alpha + p_0) = 0, \quad (18b)$$

или на основании (11)

$$v' (\overleftarrow{p}'_\alpha a_{\alpha\beta} \gamma_\beta + p_0) = 0. \quad (18b')$$

Из сопоставления (18a) и (18b') действительно вытекает наше утверждение:

$$v' = v.$$

Четырёхмерный вектор S_α представляет весьма важную в физическом отношении величину; поэтому доказательство его ковариантности относительно преобразований Лоренца составляет центральный пункт теории Дирака.

Как известно, дивергенция любого четырёхмерного вектора является инвариантом. В случае нашего вектора S этот инвариант равен нулю в силу основного уравнения непрерывности (3.8). Итак:

$$\sum_{\alpha=1}^4 \frac{\partial S_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \quad \text{и} \quad \sum_{\alpha=1}^4 \frac{\partial S'_\alpha}{\partial x'_\alpha} = 0.$$

Интегрируя по трёхмерному пространству, мы получаем, как и в (3.9):

$$\int S_4 d\tau = C, \quad \int S'_4 d\tau' = C'. \quad (19)$$

В соответствии с условием нормировки (3.12) (вероятность того, что частица находится где-нибудь в пространстве, равна единице) положим $C = \Gamma$. Мы должны показать, что константа C' также равна Γ (в противном случае понятие вероятности было бы не инвариантно относительно преобразований Лоренца).

Воспользуемся четырёхмерной теоремой Гаусса:

$$\int \text{Div } S dT = \int S_n d\tau_n \quad (19a)$$

(dT — четырёхмерный элемент объёма, $d\tau_n$ — элемент ограничивающей его трёхмерной поверхности, n — внешняя нормаль) и применим её к объёму, ограниченному гиперплоскостями $x_4 = \text{const}$ и $x'_4 = \text{const}$ и двумя бесконечно удалёнными гиперповерхностями. Последние ничего не вносят в правую часть (19a), так как волновые функции u и v (и, следовательно, вектор S) должны обращаться в нуль в бесконечности. Далее, левая часть (19a) равна нулю в силу уравнения непрерывности. Таким образом, принимая во внимание, что внешние нормали к поверхностям $x_4 = \text{const}$ и $x'_4 = \text{const}$ направлены в противоположные стороны, мы получаем из (19a):

$$\int S_4 d\tau = \int S'_4 d\tau'. \quad (19b)$$

В силу (19) это равенство означает, что $C = C'$. Итак, условие нормировки $C = \Gamma$ релятивистски инвариантно и влечёт за собой как следствие равенство $C' = \Gamma$.

Как мы видели, и сами единицы γ , и образованные из них величины $S = v\gamma u$ ведут себя как четырёхмерные векторы. К этому можно ещё добавить, что произведения $\gamma_{\mu\nu}$ и составленные из них моменты

$$M_{\mu\nu} = v\gamma_{\mu\nu}u$$

образуют четырёхмерный антисимметричный тензор второго ранга. При $\mu, \nu = 1, 2, 3$ произведения $\gamma_{\mu\nu}$ входят в выражение (2.11) для магнитного момента электрона, при μ или $\nu = 4$ — в выражение (2.12) для электрического момента. Таким образом, величины $M_{\mu\nu}$ представляют плотность тензора моментов.

Тензорный характер $\gamma_{\mu\nu}$ следует непосредственно из формулы (11). Действительно:

$$\gamma'_{\mu\nu} = a_{\mu\alpha} \gamma_{\alpha\beta} a_{\nu\beta} = (a_{\mu\alpha} a_{\nu\beta} - a_{\nu\alpha} a_{\mu\beta}) \gamma_{\alpha\beta} \quad (20)$$

(в последнем выражении предпологается, что $\alpha < \beta$, так что каждое произведение $\gamma_{\alpha\beta}$ входит в сумму только один раз). Уравнение (20) действительно представляет собой закон преобразования четырёхмерного антисимметричного тензора второго ранга, так как коэффициенты, стоящие в круглых скобках, суть миноры детерминанта $|a_{\alpha\beta}|$. Согласно нашей точке зрения A) так же преобразуются и шесть компонент $M_{\alpha\beta}$ [это легко показать, соответствующим образом обобщая рассуждения, следующие за формулой (17)].

Далее легко видеть, что четыре «тройных» произведения $\gamma_{\mu\nu\sigma}$ также преобразуются как компоненты четырёхмерного вектора, а γ_{1234} представляет собой инвариант.

Тройные произведения $\gamma_{\mu\nu\rho}$ входят в выражение для *плотности спина*, которую мы определим как

$$-i v \gamma_{\mu\nu\rho} u.$$

Как и $\gamma_{\mu\nu\rho}$, эти величины образуют четырёхмерный вектор. Его пространственные компоненты можно записать в виде $v \sigma \gamma_4 u$; таким образом, трёхмерный оператор спина с этой точки зрения даётся формулой $\sigma \gamma_4$.

С другой стороны, раньше у нас в качестве спинового оператора фигурировал просто сам вектор σ (2.13). В связи с этим мы должны обосновать необходимость нового определения и выяснить его связь с прежним.

Заметим прежде всего, что условие постоянства некоторого оператора A во времени имеет вид [см. уравнение (V) на стр. 225]:

$$H \gamma_4 A - \gamma_4 A H = 0, \quad (21)$$

или, что в данном случае то же самое (так как $\frac{dA}{dt} = 0$):

$$L \gamma_4 A - \gamma_4 A L = 0. \quad (21a)$$

Здесь H — «оператор Гамильтона», определённый соотношением (1) (см. ниже), L — «оператор Дирака» (3.2), который, будучи записан в тех же обозначениях, что и H , принимает вид:

$$L = \sum_{\alpha=1}^4 \gamma_{\alpha} p_{\alpha} + p_0.$$

Подставляя в (21a) в качестве A оператор момента количества движения N , мы получим уравнение, отличающееся от (2.24) в том отношении, что вместо N будет стоять $\gamma_4 N$. Таким образом, желая определить величину, полностью аналогичную классическому моменту количества движения, надо дополнительно умножить N (2.27) на γ_4 . В результате вместо прежнего спинового оператора σ появляется только что введённый $\sigma \gamma_4$.

Введённый в § 2 оператор N имеет, однако, самостоятельное физическое значение. Именно, условие того, что в данном состоянии u одна из компонент момента количества движения имеет определённое значение, даётся не равенством

$$\gamma_4 N_{12} u = C u,$$

а, как показано в (2.28), уравнением

$$N_{12} u = C u.$$

Действительно, именно в этом случае среднее значение момента количества движения $\gamma_4 N_{12}$ в силу условия нормировки для функции u совпадает с собственным значением C :

$$\int v \gamma_4 N_{12} u d\tau = C \int v \gamma_4 u d\tau = C.$$

Этим оправдывается наше прежнее отождествление N и σ с операторами момента количества движения и спина.

Для доказательства соотношения (21) перепишем уравнение Дирака в виде:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t} = H u, \quad H = i c \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha} \gamma_4 \vec{p}_{\alpha} + \gamma_4 p_0 \right\} + V; \quad (1)$$

сопряжённое уравнение будет:

$$+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial v}{\partial t} = vK, \quad K = ic\left\{\sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha}\gamma_{\alpha}\overset{\leftarrow}{p}_{\alpha} + \gamma_4 p_0\right\} + V. \quad (II)$$

Тогда для среднего значения \bar{A} любого не зависящего явно от времени оператора A мы получим:

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{d}{dt} \int vAu \, d\tau = \int \left(\frac{\partial v}{\partial t} Au + vA\frac{\partial u}{\partial t}\right) d\tau = \frac{i}{\hbar} \int (vKAu - vAHu) d\tau. \quad (III)$$

Здесь в соответствии с (II)

$$\int vKAu \, d\tau = \int v \left\{ ic \left[\sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha}\gamma_{\alpha}\overset{\leftarrow}{p}_{\alpha} + \gamma_4 p_0 \right] + V \right\} Au \, d\tau.$$

Принимая во внимание определение величин $\overset{\leftarrow}{p}_{\alpha}$ и \vec{p}_{α} (см. примечание к стр. 220) и интегрируя по частям, находим:

$$\int vKAu \, d\tau = \int icv \left\{ \sum_{\alpha=1}^3 \gamma_{\alpha}\vec{p}_{\alpha} + p_0 \right\} \gamma_4 Au \, d\tau + \int vVAu \, d\tau = \int v\gamma_4 H\gamma_4 Au \, d\tau.$$

Таким образом, уравнение (III) принимает вид:

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int v(\gamma_4 H\gamma_4 A - AH)u \, d\tau.$$

Требую, чтобы среднее значение A было постоянно для любой пары решений, мы должны приравнять подинтегральное выражение нулю:

$$\gamma_4 H\gamma_4 A - AH = 0, \quad (IV)$$

откуда, умножая на γ_4 , получаем:

$$H\gamma_4 A - \gamma_4 AH = 0. \quad (V)$$

Это и есть уравнение (21).

Б. Точки зрения Б) приходится придерживаться в тех случаях, когда для величин γ выбирается специальное матричное представление (что обычно и делается, — см. предыдущий параграф, стр. 215). Действительно, желая постоянно пользоваться одними и теми же матрицами, следует положить $\gamma' = \gamma$. Соответственно условия инвариантности уравнения Дирака и ковариантности четырёхмерного вектора тока влекут за собой закон преобразования волновой функции, выражаемый формулой (13). Действительно, выполнение первого условия гарантируется, коль скоро фигурирующая в (13) подстановка T удовлетворяет уравнению (15). Откладывая на некоторое время нахождение явного вида T , рассмотрим здесь вопрос о векторе тока. Для этого помимо закона преобразования волновой функции u , надо знать также и трансформационные свойства сопряжённой функции v . Положим

$$v' = v\bar{T}, \quad (22)$$

где \bar{T} — некоторая подстановка, которую ещё надлежит определить (т. е. выразить через T). Этого можно добиться, поступая так же, как и при определении T [см. уравнения (12)—(15)]. Именно, подставим (22) в (18б) и умножим результат справа на T . Поскольку, по условию $\gamma'_\nu = \gamma_\nu$, мы

получим:

$$v(\overleftarrow{p}, \overline{T}\gamma, T + p_0 \overline{T}T) = 0. \quad (22a)$$

Сравнивая коэффициенты при p_0 в (22a) и (18a), находим: $\overline{T}T = 1$, т. е.

$$\overline{T} = T^{-1}. \quad (23)$$

При этом, в силу уравнения (15), в (18a) и (22a) совпадают и коэффициенты при \overleftarrow{p}' .

Итак, по определению:

$$v' = vT^{-1}. \quad (24)$$

Теперь можно приступить к преобразованию четырёхмерного вектора тока (17). На основании (13) и (24) мы имеем:

$$S'_\alpha = vT^{-1}\gamma_\alpha Tu. \quad (25)$$

Пользуясь теперь уравнением (15), в котором заменим v на α , а α — на β , получаем:

$$S'_\alpha = v\gamma_\beta \alpha_{\alpha\beta} u.$$

В силу (17) это уравнение означает, что

$$S'_\alpha = \alpha_{\alpha\beta} S_\beta. \quad (26)$$

Сравнивая закон преобразования (26) с формулой (4), мы приходим к выводу, что величина S действительно преобразуется как четырёхмерный вектор, что и требовалось доказать.

Инвариантность условия нормировки следует теперь из уравнения непрерывности и теоремы Гаусса (19a) совершенно так же, как и в разделе А).

Точно так же, как был выяснен векторный характер S_α , можно доказать, что и величины $M_{\alpha\beta}$ образуют антисимметричный тензор второго ранга. Для этого стоит только составить равенство, аналогичное (25):

$$M'_{\mu\nu} = vT^{-1}\gamma_\mu Tu = vT^{-1}\gamma_\mu TT^{-1}\gamma_\nu Tu,$$

и дважды применить уравнение (15). Тогда оказывается, что $M'_{\mu\nu}$ и $M_{\alpha\beta}$ связаны друг с другом так же, как γ'_μ и $\gamma_{\alpha\beta}$ [см. (20)], а этот закон преобразования характерен для антисимметричного тензора второго ранга.

Нам предстоит теперь подробнее исследовать характер фигурирующего в (13) преобразования T и заняться решением определяющего его уравнения (15). Рассмотрим сначала простейший пример — частный вид преобразования Лоренца, соответствующий относительно движению вдоль оси x со скоростью βc :

$$\begin{aligned} x'_1 &= \frac{x_1 + \beta x_4}{\sqrt{1 - \beta^2}}, & x'_2 &= x_2, \\ x'_4 &= \frac{x_4 - \beta x_1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, & x'_3 &= x_3. \end{aligned}$$

Матрица коэффициентов преобразования имеет вид:

$$(a_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} \cos \Phi & 0 & 0 & \sin \Phi \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sin \Phi & 0 & 0 & \cos \Phi \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где

$$\operatorname{tg} \Phi = i\beta; \quad \cos \Phi = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}; \quad \sin \Phi = \frac{i\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Угол Φ — мнимый, поэтому $\cos \Phi > 1$. Теперь из уравнения (15) и первой и четвёртой строк (27) следует:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_1 \cos \Phi + \gamma_4 \sin \Phi &= T^{-1} \gamma_1 T, \\ -\gamma_1 \sin \Phi + \gamma_4 \cos \Phi &= T^{-1} \gamma_4 T. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Преобразуем левые части (28), вводя функции половинного угла:

$$\begin{aligned} \gamma_1 \left(\cos^2 \frac{\Phi}{2} - \sin^2 \frac{\Phi}{2} \right) + 2\gamma_4 \sin \frac{\Phi}{2} \cos \frac{\Phi}{2} &= \\ &= \left(\cos \frac{\Phi}{2} - \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2} \right) \gamma_1 \left(\cos \frac{\Phi}{2} + \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2} \right), \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\begin{aligned} -2\gamma_1 \sin \frac{\Phi}{2} \cos \frac{\Phi}{2} + \gamma_4 \left(\cos^2 \frac{\Phi}{2} - \sin^2 \frac{\Phi}{2} \right) &= \\ &= \left(\cos \frac{\Phi}{2} - \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2} \right) \gamma_4 \left(\cos \frac{\Phi}{2} + \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2} \right). \end{aligned} \quad (28b)$$

Сравнивая это с соответствующими правыми частями уравнений (28), находим ¹⁾:

$$\left. \begin{aligned} T &= \cos \frac{\Phi}{2} + \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2}, \\ T^{-1} &= \cos \frac{\Phi}{2} - \gamma_{14} \sin \frac{\Phi}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Таким образом, для данного частного случая уравнения (15) решены относительно T .

Вместо (29) можно сокращённо написать:

$$T = e^{T_{14} \frac{\Phi}{2}}, \quad T^{-1} = e^{-T_{14} \frac{\Phi}{2}}. \quad (30)$$

Такой способ записи требует некоторых пояснений, так как до сих пор мы имели только правила умножения γ_α , $\gamma_{\sigma\beta}$, ...; как показатели степени эти величины ещё не были определены. Вопрос решается с помощью разложения в ряд Тейлора:

$$e^{T_{14}\alpha} = 1 + \gamma_{14}\alpha + \gamma_{14}^2 \frac{\alpha^2}{2!} + \gamma_{14}^3 \frac{\alpha^3}{3!} + \dots$$

Пользуясь соотношением $\gamma_{14}^2 = -1$, мы можем преобразовать это следующим образом:

$$\begin{aligned} e^{T_{14}\alpha} &= \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots \right) + \gamma_{14} \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} + \dots \right) = \\ &= \cos \alpha + \gamma_{14} \sin \alpha. \end{aligned} \quad (31)$$

¹⁾ Формула (29) представляет собой одно возможное решение уравнений (28). Единственность его (с точностью до несущественного численного множителя, например λ у T и $\frac{1}{\lambda}$ у T^{-1}) вытекает из того обстоятельства, что вторая и третья строки матрицы преобразования T должны коммутировать с γ_2 и γ_3 , а следовательно, и со скаляром γ_{23} .

Полагая здесь $\alpha = \pm \frac{\Phi}{2}$, убеждаемся в тождественности формул (29) и (30).

Опять, как и раньше (ср. стр. 205), оказывается, что произведения $\gamma_{\alpha\beta}$ эквивалентны мнимой единице. С этой точки зрения уравнения (29) и (30) представляют собой не что иное, как основную формулу Эйлера, связывающую экспоненциальные функции с тригонометрическими.

Перейдём теперь к другому частному случаю — повороту на вещественный угол γ (например, в плоскости x_2, x_3). Подобно (27) матрица преобразования имеет вид:

$$(a_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Из уравнения (15) надо найти вид соответствующего преобразования T . Очевидно, в данном случае матрица T не зависит от γ_1 и γ_4 и в соответствии с (30) может быть сокращённо представлена в виде:

$$T = e^{\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}}, \quad T^{-1} = e^{-\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}}. \quad (33)$$

В самом деле, отсюда после простого вычисления получается:

$$T^{-1} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_4 \end{pmatrix} T = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_4 \end{pmatrix},$$

$$T^{-1} \begin{pmatrix} \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{pmatrix} T = \begin{pmatrix} \gamma_2 \cos \varphi + \gamma_3 \sin \varphi \\ -\gamma_2 \sin \varphi + \gamma_3 \cos \varphi \end{pmatrix},$$

что в соединении с (32) приводит к формуле (15).

Далее можно последовательно произвести преобразования (27) и (33), получив более общее преобразование:

$$T = e^{\gamma_{14} \frac{\Phi}{2}} \cdot e^{\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}}, \quad T^{-1} = e^{-\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}} \cdot e^{-\gamma_{14} \frac{\Phi}{2}}. \quad (34)$$

Относительно изменения порядка следования экспоненциальных сомножителей в T^{-1} следует заметить, что здесь его можно было бы и не производить, так как γ_{23} и γ_{14} перестановочны, но в общем случае оно необходимо. Следует иметь в виду, что благодаря наличию множителей γ перемножение экспоненциальных функций, вообще говоря, не сводится к сложению их показателей.

Самое общее преобразование Лоренца (т. е. самое общее ортогональное преобразование четырёхмерного пространства) можно получить, комбинируя три частных преобразования Лоренца (в плоскостях 14, 24, 34) и три вращения в плоскостях 23, 31 и 12. Оно, таким образом, содержит шесть параметров, которые мы обозначим посредством Φ, Θ, X и φ, θ, χ . (Вообще, число параметров ортогонального преобразования в n -мерном пространстве равно $\frac{n(n-1)}{2}$.) Схематически это наиболее общее преобразование Лоренца можно представить в виде:

$$\left. \begin{aligned} T &= e^{\gamma_{14} \frac{\Phi}{2}} \cdot e^{\gamma_{24} \frac{\Theta}{2}} \cdot e^{\gamma_{34} \frac{X}{2}} \cdot e^{\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}} \cdot e^{\gamma_{31} \frac{\theta}{2}} \cdot e^{\gamma_{12} \frac{\chi}{2}}, \\ T^{-1} &= e^{-\gamma_{12} \frac{\chi}{2}} \cdot e^{-\gamma_{31} \frac{\theta}{2}} \cdot e^{-\gamma_{23} \frac{\varphi}{2}} \cdot e^{-\gamma_{34} \frac{X}{2}} \cdot e^{-\gamma_{24} \frac{\Theta}{2}} \cdot e^{-\gamma_{14} \frac{\Phi}{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

При этом надо иметь в виду, что все операции относятся к осям, которые получаются в результате предыдущих преобразований.

Для всех указанных преобразований характерно появление *половинных* (вещественных или мнимых) углов поворота. Обычное ортогональное преобразование, которое только и использовалось в разделе А), задаётся *целыми* углами; с точки зрения Б) оно (как при извлечении квадратного корня) расщепилось на два преобразования: T и T^{-1} , связанные с поворотами на *половинные* углы. Это расщепление хорошо известно в обычной механике вращательного движения (в теории волчка). Мы рассмотрим это в приложении 17, где будет установлена связь между нашим преобразованием T и известными из теории волчка параметрами Кэли—Клейна.

В литературе, посвящённой уравнению Дирака, ψ называется *спинором*, а T — спинорным преобразованием, а спиноры теории Дирака противопоставляются тензорам теории относительности¹⁾. Как мы видели, встав на точку зрения А), можно избежать необходимости явно вводить спинорные преобразования. В этом случае мы имеем дело только с обычными тензорами (четырёхмерными векторами и т. д.). Только с точки зрения Б) приходится расщеплять обычное преобразование Лоренца на два спинорных. Тот факт, что спинорное преобразование по существу не связано именно с преобразованием Лоренца, явствует уже из возможности изобразить и обычные ортогональные преобразования трёхмерного пространства с помощью величин спинорного типа (см. дополнение 17).

§ 7. ЗАДАЧА КЕПЛЕРА И ФОРМУЛА ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ

В задаче об атоме водорода мы имеем:

$$\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 0; \quad -ie\Phi_4 = V = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Будем рассматривать стационарные состояния:

$$u = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \psi e^{-\frac{E}{\hbar c} \omega_4};$$

тогда дифференциальное уравнение (2.4) можно переписать в вещественном²⁾ трёхмерном виде следующим образом:

$$L\psi = (\gamma, \text{grad})\psi + (\gamma_4 k_4 + k_0)\psi = 0, \quad (1)$$

$$k_4 = -\frac{E-V}{\hbar c}, \quad k_0 = \frac{E_0}{\hbar c}. \quad (2)$$

Указанный выше конкретный вид $V(r)$ окажется существенным только в конце настоящего параграфа. До того все наши рассуждения [до формулы (35) включительно] будут справедливы не только для кулоновского, но и вообще для любого сферически симметричного поля.

Чтобы проинтегрировать уравнение (1), постараемся в соответствии с намеченным в гл. III (§ 3) общим планом решения найти операторы,

¹⁾ См., например, рецензию Иордана (Naturwiss. 30 августа 1935 г.) на цитированную на стр. 215 книгу де Бройля: «Теория относительности неожиданно обогатилась благодаря открытию новых физических величин (спиноров), которые, хотя и родственны тензорам, но всё же характерным образом от них отличаются».

²⁾ Введённая здесь вещественная величина k_4 отличается от определённой в (4.8) множителем i . В случае плоской волны удобнее пользоваться чисто мнимой величиной k_0 , в данном же случае — вещественной.

коммутирующие с L (и потому представляющие интегралы движения). Один из них нам уже известен — это оператор полного момента количества движения (учитывающий спин электрона) N [см. (2.27), (2.27а)]

$$N = M + \frac{\hbar}{2} \sigma.$$

Подставляя значение σ из (2.13) и M — из (III.3.18), перепишем это выражение в виде:

$$\frac{i}{\hbar} N = [r, \text{grad}] + \frac{1}{2} \gamma \tau, \quad (3)$$

где

$$\tau = \gamma_{123}, \quad \text{т. е.} \quad \gamma \tau = (\gamma_{23}, \gamma_{31}, \gamma_{12}). \quad (4)$$

Очевидно,

$$\tau^2 = -1, \quad \tau \gamma = \gamma \tau, \quad (\gamma \gamma) = 3. \quad (4a)$$

Вторым коммутирующим с L оператором является

$$K = \hbar \{([r, \text{grad}], \gamma) \tau - 1\} \gamma_4. \quad (5)$$

Связь K и N мы выясним в следующем параграфе [в связи с формулой (8.10)]. Пока что нам достаточно показать, что K действительно коммутирует с L , а также объяснить, каким образом можно прийти к выражению (5).

Как мы уже говорили, операторы N и L перестановочны. Кроме того, легко убедиться, что N коммутирует также отдельно со вторым слагаемым в L (надо иметь в виду, что \hbar_4 зависит только от r , но не от x , y , z в отдельности!). Отсюда следует, что N коммутирует и с первым членом в L , т. е. мы имеем:

$$[r, \text{grad}] (\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad}) [r, \text{grad}] = \frac{1}{2} (\gamma, \text{grad}) \gamma \tau - \frac{1}{2} \gamma \tau (\gamma, \text{grad}). \quad (6)$$

Правую часть (6) можно упростить, умножая её справа скалярно на $\gamma \tau$. При этом первый член даёт, в силу (4а),

$$-\frac{3}{2} (\gamma, \text{grad}). \quad (6a)$$

Для вычисления второго слагаемого воспользуемся очевидным тождеством

$$(\gamma, \text{grad}) \gamma = -\gamma (\gamma, \text{grad}) + 2 \text{grad}. \quad (6b)$$

На основании (6b) при умножении второго члена в (6) на $\gamma \tau$ получается:

$$-\frac{3}{2} (\gamma, \text{grad}) + (\gamma, \text{grad}) = -\frac{1}{2} (\gamma, \text{grad}). \quad (6в)$$

Таким образом, окончательно мы имеем, складывая (6а) и (6в):

$$-2 (\gamma, \text{grad}). \quad (6г)$$

С другой стороны, умножая левую часть равенства (6) скалярно на $\gamma \tau$ и вводя временно сокращённое обозначение

$$q = ([r, \text{grad}], \gamma) \tau, \quad (7)$$

мы получаем:

$$([r, \text{grad}], (\gamma, \text{grad}) \gamma) \tau - (\gamma, \text{grad}) q. \quad (7a)$$

Первое слагаемое на основании (6b) можно переписать в виде

$$\{ -([r, \text{grad}], \gamma) (\gamma, \text{grad}) + 2([r, \text{grad}], \text{grad}) \} \tau.$$

Второй член в фигурной скобке равен нулю, так как его можно привести к виду:

$$(r, [\text{grad}, \text{grad}]):$$

первый же член просто выражается через q . Таким образом, выражение (7а) принимает вид:

$$-q(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})q. \quad (8)$$

Таков результат умножения *левой* части равенства (6) на γ . Поскольку результат умножения *правой* части даётся формулой (6г), мы имеем:

$$-q(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})q = -2(\gamma, \text{grad}). \quad (9)$$

Умножим равенство (9) справа на γ_4 . Мы получим:

$$+q\gamma_4(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})q\gamma_4 = -2(\gamma, \text{grad})\gamma_4. \quad (9а)$$

Комбинируя (9а) с непосредственно очевидным соотношением

$$\gamma_4(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})\gamma_4 = -2(\gamma, \text{grad})\gamma_4, \quad (9б)$$

находим:

$$(q-1)\gamma_4(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})(q-1)\gamma_4 = 0. \quad (10)$$

Но $(q-1)\gamma_4$ с точностью до несущественного множителя \hbar совпадает с оператором K из (5). Таким образом, мы имеем:

$$K(\gamma, \text{grad}) - (\gamma, \text{grad})K = 0. \quad (10а)$$

Итак, оператор K коммутирует с первым слагаемым (γ, grad) в L . Легко видеть, что он перестановочен и со вторым слагаемым. Таким образом, окончательно:

$$KL - LK = 0, \quad (11)$$

что и требовалось доказать.

Теперь нам известны два коммутирующих с L оператора: скалярный оператор K [уравнение (5)] и векторный оператор N [уравнение (3)]. Из трёх его компонент N_1, N_2, N_3 мы используем последнюю N_3 . (Тем самым во вводимой нами системе полярных координат выделяется ось z .) При этом по соображениям вещественности (см. ниже) мы будем рассматривать оператор N_3^2 .

Итак, наряду с уравнением (11) имеем:

$$N_3^2 L - L N_3^2 = 0. \quad (12)$$

Из (11) и (12) следует, что если функция ψ является решением уравнения Дирака $L\psi = 0$, то

$$LK\psi = 0 \quad \text{и} \quad L N_3^2 \psi = 0. \quad (13)$$

Отсюда

$$K\psi = -\hbar \psi, \quad (14а)$$

$$N_3^2 \psi = -m^2 \hbar^2 \psi. \quad (14б)$$

(Знаки можно выбрать произвольно, но такая форма записи удобна для дальнейшего.) Величины $-\hbar$ и $-m^2 \hbar^2$ представляют собой (с точностью до множителей \hbar и \hbar^2) собственные значения операторов K и N_3^2 , т. е. с точки зрения уравнений (13) — *интегралы движения*.

На основании (3) и (2.29а) уравнение (14б) имеет вид:

$$\left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} \gamma_{12} \right)^2 + m^2 \right\} \psi = 0.$$

Поскольку $\gamma_{12}^2 = -1$, мы можем представить m^2 в виде $-m^2 \gamma_{12}^2$; тогда левая часть расщепляется на два сомножителя:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(m + \frac{1}{2} \right) \gamma_{12} \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial \varphi} - \left(m - \frac{1}{2} \right) \gamma_{12} \right\} \psi = 0. \quad (15)$$

Так как выражения в фигурных скобках коммутируют друг с другом, то каждое из них в отдельности, будучи применено к ψ , даёт нуль.

Формально интегрируя получающиеся при этом уравнения, находим:

$$\psi = e^{(m - \frac{1}{2}) \gamma_{12} \varphi} A$$

или соответственно

$$\psi = e^{-(m + \frac{1}{2}) \gamma_{12} \varphi} B. \quad (16)$$

Общее решение имеет вид:

$$\psi = e^{(m - \frac{1}{2}) \gamma_{12} \varphi} A + e^{-(m + \frac{1}{2}) \gamma_{12} \varphi} B. \quad (17)$$

Постоянные интегрирования A и B не зависят от φ , но зависят от остальных координат: r и θ , а также от величин γ . Именно по этой последней причине их следует писать после экспоненциальных функций в (16) и (17).

В § 6 уже было разъяснено, как следует понимать выражение $e^{\alpha \gamma_{12}}$. Именно [см. (6.31)]:

$$e^{\alpha \gamma_{12}} = \cos \alpha + \gamma_{12} \sin \alpha. \quad (18)$$

В нашем случае

$$\alpha = \left(m - \frac{1}{2} \right) \varphi$$

или соответственно

$$\alpha = - \left(m + \frac{1}{2} \right) \varphi.$$

Отсюда следует, что число m должно быть *полуцелым*, так как, в силу условия однозначности собственной функции, ψ должна периодически зависеть от угла φ с периодом 2π . (В нерелятивистской задаче Кеплера зависимость от φ определялась множителем $e^{im\varphi}$, что приводило к целочисленным значениям m .)

Поскольку в исходном уравнении Дирака в качестве коэффициентов при $\gamma_1, \dots, \gamma_4$ фигурируют только вещественные числа, естественно вообще избежать употребления мнимой единицы при интегрировании дифференциальных уравнений задачи Кеплера¹⁾. Именно по этой причине мы перешли от оператора N_3 , содержащего в соответствии с (3) мнимую единицу, к его квадрату $-N_3^2$. Соответственно, величины A и B в (17) также являются вещественными.

Займёмся теперь уравнением (14а). Оно в соответствии с (5) определено в теле, построенном на гиперкомплексных единицах $\gamma_{12}, \gamma_{23}, \gamma_{31}, \gamma_4$, т. е.

¹⁾ На это обстоятельство впервые указал Франц (см. сноску на стр. 215), работе которого мы следуем в настоящем параграфе.

в группе бикватернионов. Можно свести его к группе кватернионов, полагая

$$\psi = (1 + \gamma_4)\chi_+ + (1 - \gamma_4)\chi_- \quad (19)$$

Тогда (14а) принимает вид:

$$\begin{aligned} \{([r, \text{grad}], \gamma)\tau - 1\} (1 + \gamma_4)\chi_+ - \{([r, \text{grad}], \gamma)\tau - 1\} (1 - \gamma_4)\chi_- = \\ = -k(1 + \gamma_4)\chi_+ - k(1 - \gamma_4)\chi_- \end{aligned}$$

Умножая это слева на $1 \pm \gamma_4$, мы, как и при выводе уравнения Паули [см. (5.14)], получаем два не содержащих γ_4 уравнения:

$$\{([r, \text{grad}], \gamma)\tau - 1\} \chi_{\pm} = \mp k \chi_{\pm} \quad (20)$$

Умножая (20) слева на τ и принимая во внимание, что $\tau^2 = -1$, получим:

$$([r, \text{grad}], \gamma)\chi_{\pm} = -(\mp k + 1)\tau\chi_{\pm} \quad (20a)$$

Путём итерации можно вообще исключить отсюда величины γ . Действительно, возводя (20a) в квадрат, мы получаем:

$$([r, \text{grad}], \gamma)^2 \chi_{\pm} = -(\mp k + 1)^2 \chi_{\pm} \quad (21)$$

Выражение, стоящее в левой части, можно упростить с помощью очевидной общей формулы

$$(a, \gamma)(b, \gamma) = (a, b) + ([a, b], \gamma)\tau \quad (22)$$

Чтобы применить её в нашем случае, положим¹⁾

$$a = b = [r, \text{grad}], \quad (a, b) = [r, \text{grad}]^2, \quad [a, b] = -[r, \text{grad}]. \quad (22a)$$

Тогда

$$([r, \text{grad}], \gamma)^2 = [r, \text{grad}]^2 - ([r, \text{grad}], \gamma)\tau \quad (22b)$$

Член в правой части, содержащий величины γ , можно исключить, воспользовавшись уравнением (20). Тогда вместо (22b) мы получаем:

$$([r, \text{grad}], \gamma)^2 = [r, \text{grad}]^2 - (\mp k + 1) \quad (22b')$$

Таким образом, уравнение (21) принимает вид:

$$[r, \text{grad}]^2 \chi_{\pm} = \{(\mp k + 1) - (\mp k + 1)^2\} \chi_{\pm},$$

или, что то же самое,

$$[r, \text{grad}]^2 + (\mp k)(\mp k + 1) \chi_{\pm} = 0. \quad (23)$$

Оператор

$$[r, \text{grad}]^2 = -\frac{1}{h^2} M^2$$

будет рассмотрен в приложении (12) [формула (17)], где будет показано, что он представляет собой не что иное, как дифференциальный оператор шаровых функций:

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Таким образом, уравнение (23) решается в шаровых функциях. При этом из условия регулярности решения в точках $\cos \vartheta = \pm 1$ следует, что

¹⁾ Последнее из соотношений (22a) проще всего доказать, воспользовавшись прямоугольной системой координат. Отличный от нуля результат получается только при дифференцировании по r , все остальные производные выпадают.

$\mp k(\mp k + 1)$ должно быть равно $l(l + 1)$, где $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, т. е. k должно быть *целым числом*. Роль индекса шаровых функций играет одно из чисел $\mp k$ или $\pm k - 1$ (именно, то из них, которое имеет положительное значение).

Чтобы избавиться от необходимости различать эти два случая, введём шаровые функции с отрицательным индексом $-l - 1$, по определению полагая их равными функциям с индексом l . Тогда числа $-k$ и $+k - 1$ соответствуют одной и той же шаровой функции (то же относится и к паре $+k$ и $-k - 1$). Следовательно, можно всюду пользоваться в качестве индекса шаровой функции только одним из этих чисел, например $\pm k$. Таким образом, решение уравнения (21) имеет вид:

$$\chi_{\pm} = \sum_{\mu} P_{\mp k}^{\mu}(\cos \vartheta) \begin{Bmatrix} C_{\mu} \cos \mu \varphi \\ D_{\mu} \sin \mu \varphi \end{Bmatrix}. \quad (24)$$

Коэффициенты C_{μ} и D_{μ} не зависят от ϑ и φ , но являются функциями l и γ (и, конечно, μ и k).

Сравнивая полученные результаты с нерелятивистским случаем, мы видим, что введённая в (14а) величина k играет роль шредингеровского квантового числа l . Поскольку k принимает все целочисленные значения, а l — только положительные (и нуль), число состояний здесь удваивается по сравнению с нерелятивистским случаем; физическая причина этого состоит в двойной возможности ориентации электронного спина. Как видно из (14а), различным значениям k соответствуют действительно различные состояния. В самом деле, k входит в (14а) линейно, а потому это уравнение для разных k имеет различный вид. В нерелятивистском случае аналогичного уравнения не имеется; напротив, число l входит в уравнение Шредингера лишь в комбинации $l(l - 1)$.

В конце этого параграфа будет показано, что значение $k = 0$ надо исключить. Таким образом, допустимые значения k суть:

$$k = \begin{cases} +1, +2, +3, \dots \\ -1, -2, -3, \dots \end{cases} \quad (25)$$

Следует со всей определённостью подчеркнуть, что этот двойной знак никак нельзя отождествлять с фигурирующим в (24). Последний возник благодаря множителям $1 \pm \gamma_4$ и, таким образом, обусловлен не неопределённостью знака k .

Дальнейшие выводы можно сделать, сравнивая (24) и (17). Именно, оказывается, что индекс μ при заданном m может принимать только два значения:

$$\mu = \begin{cases} m - \frac{1}{2}, \\ -\left(m + \frac{1}{2}\right). \end{cases} \quad (26)$$

Таким образом, сумма в (24) (как для χ_{+} , так и для χ_{-}) состоит всего из двух членов. Как и должно быть, оба значения (26) оказываются *целыми числами* (действительно, m — полуцелое, см. стр. 232). Кроме того, из сопоставления (24) и (17) видно, что коэффициенты C и D должны быть таковы, чтобы из членов с синусом и косинусом в сумме составились просто показательные функции от аргумента $\gamma_{12}\mu\varphi$. Выписывая явно оба слагаемых в (24)

и обозначая стоящие при них коэффициенты через a и b , мы имеем:

$$\chi_{\pm} = P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}}(\cos \vartheta) e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})\varphi} a_{\pm} + P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}}(\cos \vartheta) e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})\varphi} b_{\pm}. \quad (27)$$

Надо заметить, что в силу (26) верхний индекс шаровой функции во второй строчке следовало бы приравнять $-(m+\frac{1}{2})$. Полагая вместо этого $\mu = (m+\frac{1}{2})$ (что несколько удобнее для дальнейшего), мы пользуемся тем обстоятельством, что с точностью до постоянного множителя (который можно включить в b_{\pm}) P_n^{μ} совпадает с P_n^{μ} [см. (1.3.16д)].

Выражение (27) получено нами как решение итерированного уравнения (23). Однако оно должно удовлетворять и неитерированному уравнению (20). Благодаря этому обстоятельству коэффициенты a_{\pm} и b_{\pm} , характеризующие радиальную зависимость (27), оказываются связанными друг с другом. Действительно, угловая зависимость волновой функции полностью и окончательно определяется формулой (27), и потому при подстановке (27) в (20) величины, зависящие от ϑ и φ , должны взаимно уничтожиться.

Фигурирующий в (20) оператор

$$([r, \text{grad}], \gamma)$$

будет вычислен (в полярных координатах) в разделе А дополнения 15 и применён к обоим слагаемым (27). На основании формулы (9) дополнения 15 мы имеем:

$$\begin{aligned} ([r, \text{grad}], \gamma) P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})\varphi} &= \\ &= \tau \left(m - \frac{1}{2} \right) P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})\varphi} - \tau P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})\varphi} \gamma_{12}. \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\begin{aligned} ([r, \text{grad}], \gamma) P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})\varphi} &= -\tau \left(m + \frac{1}{2} \right) P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})\varphi} + \\ &+ \tau \left(\mp k + m + \frac{1}{2} \right) \left(\mp k - m + \frac{1}{2} \right) P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})\varphi} \gamma_{12}. \end{aligned} \quad (28б)$$

Подставляя (27) в (20) и пользуясь (28а, б), находим после приведения подобных членов:

$$\begin{aligned} &\left\{ \left(\mp k + m + \frac{1}{2} \right) P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})\varphi} - \gamma_{12} P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})\varphi} \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ a_{\pm} + \left(\mp k - m + \frac{1}{2} \right) \gamma_{12} b_{\pm} \right\} = 0. \end{aligned}$$

Как и должно было быть, величины, зависящие от углов ϑ и φ , выделились в отдельный сомножитель, и мы получаем следующее соотношение, связывающее a_{\pm} и b_{\pm} :

$$a_{\pm} = - \left(\mp k - m + \frac{1}{2} \right) \gamma_{12} b_{\pm}. \quad (29)$$

Чтобы, наконец, найти зависимость наших собственных функций от r , надо вернуться к исходному уравнению Дирака (1), подставив туда в качестве ψ выражение (19), в котором функции χ_{\pm} даются формулой (27), а коэффициенты a_{\pm} — формулой (29). Мы знаем наперёд, что при этом величины, зависящие от углов, должны выпасть, и останется только дифференциальное уравнение для радиальных функций. В разделе Б дополнения 15 это подтверждено прямым расчётом; найденное там [см. формулу (32) дополне-

ния 15] радиальное дифференциальное уравнение имеет вид:

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{1 \mp k}{r}\right) b_{\pm} + \gamma_3 (\mp k_4 + k_0) b_{\mp} = 0. \quad (30)$$

Чтобы освободиться от величин γ , положим:

$$b_+ = R_1, \quad b_- = -\gamma_3 R_2. \quad (31)$$

Тогда R_1 и R_2 оказываются функциями только от r ; они удовлетворяют следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1-k}{r}\right) R_1 &= (-k_4 + k_0) R_2, \\ \left(\frac{d}{dr} + \frac{1+k}{r}\right) R_2 &= (+k_4 + k_0) R_1. \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Подставляя сюда значения k_4 и k_0 из (2), находим:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1-k}{r}\right) R_1 &= \frac{1}{\hbar c} (E - V + E_0) R_2, \\ \left(\frac{d}{dr} + \frac{1+k}{r}\right) R_2 &= \frac{1}{\hbar c} (-E + V + E_0) R_1. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Из (33) можно сразу вывести одно качественное следствие. Именно, то обстоятельство, что в первое уравнение входит $E_0 + E$, а во второе $E_0 - E$, означает, что в нерелятивистском (шредингеровском) приближении $R_2 \ll R_1$ [см. в связи с этим рассуждения о «большой» и «малой» волновых функциях в приближении Паули (5.22а)]. Согласно (31) R_1 соответствует функции b_+ [при этом индекс шаровой функции в (27) равен $-k$], а R_2 — функции b_- (индекс шаровой функции равен $+k$). Таким образом, переходя к нерелятивистской волновой механике, мы имеем:

$$R_2 \cdot (\text{множитель при } P_{+k}) \ll R_1 \cdot (\text{множитель при } P_{-k}). \quad (34)$$

(Верхний индекс шаровой функции опущен.) Приблизённо легко выразить R_2 через R_1 . Именно, пренебрежём величиной V по сравнению с $E + E_0 \sim 2E_0$. Тогда из первого уравнения (33) мы получим:

$$R_2 = \frac{\hbar c}{2E_0} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1-k}{r}\right) R_1. \quad (34a)$$

Подставляя далее (34a) во второе уравнение (33), находим:

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{1+k}{r}\right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{1-k}{r}\right) R_1 = \frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} (-E + E_0 + V) R_1,$$

что легко приводится к виду ($E_0 = m_0 c^2$, $W = E - E_0$):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + 2\frac{d}{dr} - \frac{k(k-1)}{r^2}\right) R_1 = -\frac{2m_0}{\hbar^2} (W - V) R_1.$$

Это есть не что иное, как радиальное уравнение Шредингера в виде (II.1.3).

Чтобы сделать это совпадение полным, надо ещё отождествить шредингеровское $l(l+1)$ с дираковским $k(k-1)$. Как мы уже указывали в связи с уравнением (24), имеются две возможности:

$$k = \begin{cases} l+1, \\ -l. \end{cases} \quad (35)$$

В следующих параграфах мы ещё вернёмся к этому вопросу.

В заключение выведем формулу тонкой структуры. Для этого надо точно решить систему уравнений (33), подставляя в качестве V конкретное кулоновское выражение $V = -\frac{Ze^2}{r}$ (здесь это впервые становится существенным).

Как всегда, прежде всего надо определить асимптотическое поведение решений. Для этого вычёркиваем в (33) все члены, содержащие $\frac{1}{r}$ (в частности, к ним принадлежит и V), и получаем:

$$\frac{dR_1}{dr} = \frac{1}{\hbar c} (E_0 + E) R_2,$$

$$\frac{dR_2}{dr} = \frac{1}{\hbar c} (E_0 - E) R_1.$$

Сделаем характерную для линейных уравнений с постоянными коэффициентами подстановку

$$R_1 = A_1 e^{-\lambda r}, \quad R_2 = A_2 e^{-\lambda r}; \quad (36)$$

тогда для определения λ , A_1 , A_2 находим следующие уравнения:

$$-\lambda A_1 = \frac{1}{\hbar c} (E_0 + E) A_2,$$

$$-\lambda A_2 = \frac{1}{\hbar c} (E_0 - E) A_1.$$

Предполагая, что $E < E_0$ (дискретный спектр) и выбирая должный (положительный) знак перед корнем, получаем отсюда:

$$\lambda = + \frac{1}{\hbar c} \sqrt{E_0^2 - E^2}. \quad (37)$$

Как и в нерелятивистской кеплеровой задаче, введём в качестве независимого переменного величину

$$\rho = 2\lambda r \quad (38)$$

и перейдём от асимптотического выражения (36) к полному решению, вводя также две функции от ρ — v_1 и v_2 :

$$\left. \begin{aligned} R_1 &= v_1 e^{-\frac{1}{2}\rho}, & R_2 &= v_2 e^{-\frac{1}{2}\rho}, \\ \frac{dR_1}{dr} &= 2\lambda \left(v_1' - \frac{1}{2} v_1 \right) e^{-\frac{1}{2}\rho}, & \frac{dR_2}{dr} &= 2\lambda \left(v_2' - \frac{1}{2} v_2 \right) e^{-\frac{1}{2}\rho} \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

(штрих означает дифференцирование по ρ). Подставляя (39) в уравнения (33) и сокращая на $2\lambda e^{-\frac{1}{2}\rho}$, находим ($\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры):

$$\left. \begin{aligned} v_1' + \left(\frac{1-k}{\rho} - \frac{1}{2} \right) v_1 &= \left(\frac{\alpha Z}{\rho} + \frac{1}{2} \frac{E_0 + E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}} \right) v_2, \\ v_2' + \left(\frac{1+k}{\rho} - \frac{1}{2} \right) v_2 &= \left(-\frac{\alpha Z}{\rho} + \frac{1}{2} \frac{E_0 - E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}} \right) v_1. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Переходя к исследованию поведения искоемых функций около точки $\rho = 0$, представим их в виде выражений

$$v_1 = \rho^\gamma \sum a_\nu \rho^\nu, \quad v_2 = \rho^\gamma \sum b_\nu \rho^\nu \quad (41)$$

с одинаковыми показателями степени γ , но различными коэффициентами a_ν и b_ν . Подставляя это в (40) и сравнивая коэффициенты при $\rho^{\gamma-1}$, находим определяющие уравнения для γ :

$$(\gamma + 1 - k) a_0 = \alpha Z b_0, \quad (\gamma + 1 + k) b_0 = -\alpha Z a_0.$$

При почленном перемножении обоих уравнений коэффициенты a_0 и b_0 выпадают, и мы получаем:

$$(\gamma + 1)^2 - k^2 = -\alpha^2 Z^2,$$

откуда (мы выбираем правильный — положительный — знак перед корнем)

$$\gamma = -1 + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}. \quad (42)$$

Сравнивая теперь коэффициенты при $\rho^{\gamma+\nu+1}$ в (40), найдём рекуррентную формулу для a_ν , b_ν . Обозначим сокращённо

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{E_0 - E}{E_0 + E}}, \quad \text{т. е.} \quad \frac{E_n - E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}} = \varepsilon, \quad \frac{E_0 + E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}} = \frac{1}{\varepsilon} \quad (43)$$

и соберём члены с a_ν , b_ν в левой, а с $a_{\nu-1}$, $b_{\nu-1}$ в правой части равенства. Мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} (\gamma + \nu + 1 - k) a_\nu - \alpha Z b_\nu &= \frac{1}{2} \left(a_{\nu-1} + \frac{1}{\varepsilon} b_{\nu-1} \right), \\ (\gamma + \nu + 1 + k) b_\nu + \alpha Z a_\nu &= \frac{1}{2} (b_{\nu-1} + \varepsilon a_{\nu-1}). \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Отсюда прежде всего находится отношение a_ν/b_ν . Действительно, если второе из уравнений (44) умножить на $-1/\varepsilon$ и затем сложить с первым, то сумма правых частей обращается в нуль, и мы получаем:

$$\frac{a_\nu}{b_\nu} = \frac{\varepsilon \alpha Z + (\gamma + \nu + 1 + k)}{\varepsilon (\gamma + \nu + 1 - k) - \alpha Z}. \quad (45)$$

Далее заменяем в (44) ν на $\nu + 1$ и добиваемся обращения в нуль порознь правых частей обоих уравнений, для чего полагаем:

$$\frac{a_\nu}{b_\nu} = -\frac{1}{\varepsilon}. \quad (46)$$

Тогда в силу (44) обращаются в нуль все последующие коэффициенты:

$$a_{\nu+1}, \quad b_{\nu+1}, \quad a_{\nu+2}, \quad b_{\nu+2}, \quad \dots$$

Таким образом, формула (46) [совместно с (45)] представляет собой *условие обрыва* разложения (41). Пусть ряд (41) обрывается на n_r -м члене. Тогда в (45) и (46) следует положить $\nu = n_r$, и мы имеем:

$$n_r + \gamma + 1 - k - \frac{\alpha Z}{\varepsilon} + \varepsilon \alpha Z + n_r + \gamma + 1 + k = 0. \quad (47)$$

Подставляя сюда значение γ из (42) и производя соответствующие преобразования, находим:

$$n_r + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2} = \frac{\alpha Z}{2} \left(\frac{1}{\epsilon} - \epsilon \right). \quad (48)$$

Число n_r представляет собой степень полиномов, входящих в функции v_1 и v_2 . В силу определения ϵ (43) мы имеем:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon} - \epsilon \right) = \frac{E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}} = \left\{ \left(\frac{E_0}{E} \right)^2 - 1 \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (49)$$

Таким образом, формула (48) принимает вид:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{E_0}{E} \right)^2 - 1 &= \frac{\alpha^2 Z^2}{(n_r + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2})^2}, \\ \frac{E}{E_0} &= \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(n_r + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2})^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

Это и есть хорошо известная *формула тонкой структуры* из тома I [гл. V, формула (26)]. Она была выведена из дираковской теории электрона одновременно Гордоном¹⁾ и Дарвином²⁾.

Из сопоставления настоящей и прежней формул явствует, что наше k^2 играет роль «азимутального квантового числа» n_φ старой теории (последнее, кстати, раньше часто и обозначалось буквой k). Имеется, однако, то существенное различие, что k принимает как положительные, так и отрицательные значения, в то время как n_φ в силу самой своей природы всегда должно оставаться положительным. Для определения положения уровней тонкой структуры это обстоятельство не имеет никакого значения, так как k входит в (50) только квадратично. Однако, как будет видно в следующем параграфе, оно весьма существенно для нумерации уровней тонкой структуры. Последние оказываются, вообще говоря, двойными. Это обстоятельство открывает путь к раскрытию природы дублетов в спектре водорода (и аналогичных им — в спектрах щелочных металлов).

То обстоятельство, что значение $k = 0$ является запрещенным, формально вытекает из формулы (50) для энергии. Действительно, при $k = 0$ E оказывается комплексной величиной. Более подробное обоснование этого запрета будет дано позднее (см. стр. 246).

Вопрос об экспериментальной проверке формулы тонкой структуры пока ещё не разрешён полностью. В то время как в тщательных американских работах (особенно Хаустона и его учеников) обнаруживаются, повидимому, небольшие расхождения с теорией, другие исследования⁴⁾ подтверждают формулу тонкой структуры с точностью до погрешностей эксперимента. Как дружески сообщил автору К. В. Мейснер, идеальный опыт состоял бы в наблюдении пучка атомов водорода в направлении, перпендикулярном к их

¹⁾ W. Gordon, Zs. f. Phys. 48, 11 (1928).

²⁾ G. G. Darwin, Proc. Roy Soc. A118, 654 (1928).

³⁾ Дирак пользуется вместо k буквой j (также с двойным знаком). Нам это обозначение представляется неудачным, так как символ j надо сохранить для внутреннего квантового числа, которое в дальнейшем окажется небесполезным.

⁴⁾ Maria Heyden, Zs. f. Phys. 106, 499 (1937).

движению. Действительно, при этом влияние эффекта Доплера было бы почти полностью исключено. Вопрос, к которому в конце концов сводится дело, состоит в том, не действуют ли между электроном и протоном, помимо кулоновских, ещё дополнительные силы типа рассматриваемых в ядерной физике¹⁾.

§ 8. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ УРОВНИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ. ПОДРОБНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

В предыдущем параграфе были последовательно введены квантовые числа теории Дирака. Таковыми оказались:

$$m, k, n_r.$$

Сопоставим их с квантовыми числами теории Шредингера, которые в отличие от дираковских запишем в виде:

$$\bar{m}, l, \bar{n}_r.$$

В противоположность полуцелому квантовому числу m теории Дирака \bar{m} является целым. Это различие обусловлено, естественно, спином электрона; связанный с ним момент количества движения, равный $\pm 1/2$, как раз и добавляется к шредингеровскому квантовому числу \bar{m} . Отметим это обстоятельство, полагая

$$m = \bar{m} \pm \frac{1}{2}. \quad (1)$$

Главное различие в нумерации квантовых состояний в том, что по Дираку k может иметь любой знак, в то время как в теории Шредингера l не может быть отрицательно. Связь между k и l была выяснена ещё в предыдущем параграфе, когда было показано, что при переходе к нерелятивистскому случаю заметной остаётся в соответствии с (7.34) только шаровая функция с индексом $-k$ (при этом само k , как мы знаем, может быть и положительным и отрицательным). Отсюда вытекала следующая связь между k и l в (7.35):

$$\left. \begin{aligned} k &= l + 1, & k > 0, \\ |k| &= l, & k < 0. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Наконец, обратимся к радиальным квантовым числам n_r и \bar{n}_r . Чтобы найти связь между ними, введём главное квантовое число n , которому в теории Шредингера соответствует один бальмеровский терм, а в теории Дирака — совокупность подуровней мультиплета. В теории Шредингера мы имеем:

$$n = \bar{n}_r + l + 1. \quad (3a)$$

В теории Дирака аналог числа n даётся знаменателем формулы (7.50), если устремить в нём α к нулю. Фигурирующий там квадратный корень воз-

¹⁾ Ср. по этому поводу также замечание Пастернака: S. Pasternack, Phys. Rev. 54, 1113 (1938). (Прим. авт.)

Экспериментальная проверка формулы для тонкой структуры привела к открытию в 1947 г. Лэмбом и Ризерфордом сдвига уровней в атоме водорода — расщепления термов $2S_{1/2}$ и $2P_{1/2}$, которые в теории Дирака совпадают. Объяснение этого эффекта, названного лэмбовским смещением, связано с квантовомеханическими флуктуациями вакуума. С учётом вакуумных эффектов совпадение теории с опытом оказывается сейчас идеальным. (Прим. ред.)

ник из формулы (7.42) для γ и потому должен быть взят с положительным знаком; таким образом, мы получаем:

$$n = n_r + \sqrt{k^2} = n_r + |k|. \quad (36)$$

Сравнивая это с (3а) и пользуясь (2), находим:

$$n_r = \begin{cases} \bar{n}_r, & k > 0, \\ \bar{n}_r + 1, & k < 0. \end{cases} \quad (4)$$

Как видно из формулы (3а), бальмеровский терм нерелятивистской теории состоит из n совпадающих друг с другом уровней энергии. Действительно, при заданном n \bar{n}_r может принимать все значения от нуля до $n - 1$; при этом каждому n_r однозначно соответствует определённое значение l . С другой стороны, из формулы (36) на первый взгляд как будто бы следует, что мультиплет, определяемый данным n , состоит из $2n$ подуровней (совпадающих или близких друг с другом). Действительно, радиальное квантовое число n_r в данном случае попрежнему может изменяться от нуля до $n - 1$, но каждому n_r соответствуют два (отличающихся знаком) значения k . Мы покажем, однако, что, как можно убедиться из рекуррентной формулы (7.44), случай $n_r = 0$ представляет исключение.

При $n_r = 0$ полиномиальные множители в v_1 и v_2 [см. (7.41)] имеют нулевой порядок, т. е. они равны соответственно a_0 и b_0 . В силу (7.44) a_0 и b_0 должны удовлетворять следующим уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} (\gamma + 1 - k)a_0 - \alpha Z b_0 &= 0, \\ (\gamma + 1 + k)b_0 + \alpha Z a_0 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Подставляя сюда γ из (7.42), легко убедиться, что из обоих уравнений получается одно и то же значение для отношения a_0/b_0 , а именно:

$$\frac{a_0}{b_0} = \frac{\alpha Z}{\sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2} - k}. \quad (6)$$

Далее, условие обрыва ряда (7.46) даёт:

$$\frac{a_0}{b_0} = -\frac{1}{\epsilon}. \quad (7)$$

В силу (7.43) ϵ является положительной величиной, следовательно, $\frac{a_0}{b_0}$ отрицательно. Но из (6) видно, что это возможно лишь при положительном k . Таким образом, значению $n_r = 0$ соответствуют не два отличающихся знаком значения k , а лишь одно: $k = +n$. Поэтому мультиплет состоит не из $2n$, а только из $2n - 1$ подуровней. Из них один ($n_r = 0$) — простой, а остальные ($n_r = 1, 2, \dots, n - 1$) — двукратные.

Значение $n_r = 0$ соответствует круговым орбитам старой квантовой теории, $n_r = 1, \dots, n - 1$ — эллиптическим орбитам. Первые отвечают наивысшим, последние — соответственно всё более и более низким подуровням мультиплетов (см. т. I, рис. 75 и 76).

Резюмируем сказанное. Согласно теории Дирака при заданном главном квантовом числе n мультиплет состоит из $n - 1$ дважды вырожденных уровней (каждый из которых соответствует значениям k , отличающимся только знаком) и одного простого. Последнему соответствует наибольшая энергия.

Дополнительно возникающее вырождение по числу m мы рассмотрим ниже.

В чисто кулоновском поле вырожденный характер энергетических уровней с данным значением $|k|$ никак не сказывается. Он проявляется, однако, при наличии магнитного поля или просто внутриатомного центрального поля некулоновского типа. Речь идёт, таким образом, об эффекте Зеемана или о спектрах сложных атомов, особенно атомов щелочных металлов. Благодаря различным условиям экранировки уровни с одним и тем же $|k|$ (совпадающие в случае водорода) в рентгеновских спектрах более сложных атомов расщепляются, превращаясь в так называемые «дублеты экранирования». В то же время уровням с различными $|k|$ как у водорода, так и в рентгеновских спектрах более сложных атомов соответствуют различные значения энергии (определяемые формулой тонкой структуры). Это явление имеет чисто релятивистскую природу, чем и объясняется название «релятивистские дублеты».

Все эти соотношения пояснены на уже упоминавшихся рис. 75 и 76 в т. I. Символ n_r в левой части этих рисунков указывает на связь между дираковским квантовым числом k и прежним «азимутальным квантовым числом» n_r , о которой уже говорилось в конце предыдущего параграфа.

n	n_r	$ k $	k	l	Терм	
3	0	3	+3	2	D	$5/2$
			-2	2		$3/2$
	1	2	+2	1	P	$3/2$
			-1	1		$1/2$
	2	1	-1	0	S	$1/2$
			+1	0		$1/2$

щелочных металлов: высший уровень водородного мультиплета соответствует терму $D_{5/2}$, далее следуют (совпадающие друг с другом) уровни $D_{3/2}$ и $P_{3/2}$ и, наконец, ниже всех расположены термы $P_{1/2}$ и $S_{1/2}$ (также совпадающие друг с другом). В последнем столбце приведено «внутреннее квантовое число» j (или лучше, квантовое число, характеризующее полный момент количества движения).

Мы покажем сейчас, что квантовое число j появляется в теории Дирака вполне законным образом в противоположность заимствованному из теории Шредингера и недопустимому в данном случае «орбитальному квантовому числу» l .

Для этой цели рассмотрим оператор полного момента количества движения N (7.3) и образуем его «квадрат»:

$$N^2 = N_1^2 + N_2^2 + N_3^2.$$

На основании (7.3) и (7.4а) мы получаем:

$$N^2 = -\hbar^2 \{ [r, \text{grad}]^2 + ([r, \text{grad}], \gamma) \tau - \frac{3}{4} \}. \quad (8)$$

Далее, рассмотрим оператор K (7.5):

$$K = \hbar \{ ([r, \text{grad}], \gamma) \tau - 1 \} \gamma_4$$

и опять, пользуясь (7.4а), составим его квадрат:

$$K^2 = \hbar^2 \{ -([r, \text{grad}], \gamma)^2 - 2([r, \text{grad}], \gamma) \tau + 1 \}.$$

Первое слагаемое в фигурных скобках было вычислено в (7.226). Подставляя сюда полученный там результат, находим:

$$K^2 = \hbar^2 \{ -[r \cdot \text{grad}]^2 - ([r \cdot \text{grad}] \cdot \gamma) \tau + 1 \}. \quad (9)$$

Вычтем теперь почленно (8) из (9). Мы имеем:

$$K^2 - N^2 = \left(1 - \frac{3}{4}\right) \hbar^2 = \frac{1}{4} \hbar^2, \quad N^2 = K^2 - \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (10)$$

В силу (7.14) собственное значение оператора K равно $-k\hbar$; следовательно, собственное значение K есть $k^2\hbar^2$. Отсюда

$$N^2 = \left(k^2 - \frac{1}{4}\right) \hbar^2 = \left(|k| - \frac{1}{2}\right) \left(|k| + \frac{1}{2}\right) \hbar^2. \quad (11)$$

(Собственно, в обе части равенства ещё входит множителем соответствующая функция, но здесь её можно опустить.) Положим:

$$j = |k| - \frac{1}{2}. \quad (12)$$

Тогда

$$N^2 = j(j+1) \hbar^2. \quad (13)$$

Равенство (12) узаконивает использование числа j в теории Дирака, сводя его к квантовому числу k . С другой стороны, в теории Шредингера (равно как и нерелятивистской теории) j было по существу чуждо и вводилось лишь с помощью специального представления о спине и двойкой возможности его ориентации относительно орбитального момента количества движения. Постулированная там двузначная связь

$$j = \begin{cases} l + \frac{1}{2} \\ l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (14)$$

в теории Дирака возникает сама собой благодаря двойному знаку k . Действительно, если принять во внимание связь (2) между k и l , то (12) превращается в (14): при $k \leq 0$ из (12) получается для j

$$l - \frac{1}{2} \text{ или } l + 1 - \frac{1}{2}.$$

Как видно из (13), квадрат полного момента количества движения (орбитальный момент плюс спин) выражается в теории Дирака через квантовое число j совершенно так же, как квадрат орбитального момента количества движения в теории Шредингера — через l . В самом деле, в гл. III [формулы (3.35) и (3.38)] было показано, что

$$M^2 = l(l+1) \hbar^2. \quad (15)$$

(Мы пишем l вместо L .)

До сих пор мы рассматривали только «скелет» собственных функций — характеризующие их квантовые числа. Обратимся теперь к самим собственным функциям и представим в более простом виде аналитическое выражение, полученное для них в предыдущем параграфе.

Подставляя (7.29) в (7.27), мы получаем:

$$\chi_{\pm} = \left\{ P_{\mp k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12} \left(m-\frac{1}{2}\right) \varphi} \gamma_{31} \left(\mp k - m + \frac{1}{2}\right) + P_{\mp k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12} \left(m+\frac{1}{2}\right) \varphi} \right\} b_{\pm}. \quad (16)$$

Подставим сюда b_{\pm} из (7.31) и образуем произведения:

$$(1 + \gamma_4)\chi_+ = \left\{ P_{-k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})} \gamma_{31} \left(-k - m + \frac{1}{2} \right) + P_{-k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})} \right\} R_1 (1 + \gamma_4), \quad (17)$$

$$(1 - \gamma_4)\chi_- = - \left\{ P_k^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})} \gamma_{31} \left(k - m + \frac{1}{2} \right) + P_k^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})} \right\} \gamma_2 R_2 (1 + \gamma_4). \quad (18)$$

В связи с этим следует заметить, что в первом из названных произведений $1 + \gamma_4$ можно было поменять местами с выражением в фигурной скобке. Так же обстояло дело и с $1 - \gamma_4$ во втором произведении, но при такой перемене порядка множителей $1 - \gamma_4$ (благодаря члену с γ_3) превратилось в $1 + \gamma_4$.

Складывая (17) и (18), мы получаем, в силу (7.19):

$$\psi = \left\{ \left[P_{-k}^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})} \gamma_{31} \left(-k - m + \frac{1}{2} \right) + P_{-k}^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})} \right] R_1 - \left[P_k^{m-\frac{1}{2}} e^{\gamma_{12}(m-\frac{1}{2})} \gamma_{31} \left(k - m + \frac{1}{2} \right) + P_k^{m+\frac{1}{2}} e^{-\gamma_{12}(m+\frac{1}{2})} \right] \gamma_3 R_2 \right\} (1 + \gamma_4). \quad (19)$$

Здесь уместно сделать замечание относительно возможных значений m . Как хорошо известно (см., например, т. I, рис. 29, 30), m представляет собой составляющую полного момента количества движения по некоторому заданному направлению, а j (точнее, $\sqrt{j(j+1)}$) — абсолютную величину момента. Поэтому следует ожидать, что

$$j = m_{\max}, \quad -j = m_{\min}. \quad (20)$$

Формула (19) представляет решение уравнения Дирака только при $|m| \leq j$. Это связано с тем, что при выводе (19) были использованы (в приложении 15) некоторые соотношения между шаровыми функциями, справедливые отнюдь не при любых значениях верхних индексов.

Заметим, впрочем, что при $|m| > j$ выражение (19) вообще тождественно обращается в нуль, так как при этом равны нулю частично сами шаровые функции, частично — множители при них.

Нам предстоит теперь более подробно исследовать *радиальные функции* R_1 и R_2 в (18). При этом мы будем рассматривать только конкретный случай кеплеровой задачи (всё предыдущее было справедливо для любого сферически симметричного поля). Структура функций R_1 и R_2 в данном случае дается формулами (7.39), (7.41) и (7.42); собирая их, мы получаем:

$$\left. \begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \end{array} \right\} = e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^{-1+\sqrt{k^2-\alpha^2}} \cdot \begin{Bmatrix} P_1(\rho) \\ P_2(\rho) \end{Bmatrix}, \quad (21)$$

$$\rho = \frac{2r}{\hbar c} \sqrt{E_0^2 - E^2}, \quad (21a)$$

P_1, P_2 — полиномы степени n_r относительно ρ .

При этом энергию E можно считать выраженной с помощью формулы тонкой структуры (7.50) через α , E_0 и квантовые числа k, n_r .

Как видно из первого сомножителя в (21), дираковские радиальные функции в бесконечности обращаются в нуль по тому же (показательному) закону, что и в теории Шредингера, и притом тем быстрее, чем меньше главное квантовое число.

Второй сомножитель в (21) означает, что при $r=0$ все функции R обращаются в нуль, коль скоро

$$k = \pm 2, \pm 3, \dots$$

Только при $k = \pm 1$ $R(r)$ обращается в бесконечность по закону $r^{-\eta}$, где

$$\eta = 1 - \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2} = \frac{1}{2} \alpha^2 Z^2 + \dots \quad (22)$$

Противоречит ли это условиям задачи, согласно которым надо, вообще говоря, требовать непрерывности собственных функций? Очевидно, нет — в противном случае все ¹⁾ S -уровни водорода, равно как и термы $P_{1/2}$, не могли бы существовать (действительно, как видно из таблицы, они соответствуют $k = \pm 1$).

Чтобы обосновать наше утверждение, заметим прежде всего, что особенность (22) ни в какой степени не затрудняет нормировку волновых функций, так как $d\tau = r^2 dr$, и потому подинтегральное выражение в нормировочном интеграле (3.12) при $r=0$ не обращается в бесконечность, а напротив, даже равно нулю.

Однако возможность пронормировать собственную функцию сама по себе ещё не является достаточным критерием допустимости той или иной особенности. Чтобы убедиться в этом, вернёмся на минуту к нерелятивистской задаче Кеплера и рассмотрим ту шредингеровскую функцию, которая в нуле ведёт себя, как r^{-1} . В гл. II мы видели, что корни характеристического уравнения (II.1.76) суть l и $-l-1$. Если второй корень равен $-2, -3, \dots$, то нормировочный интеграл расходится; следовательно, такие значения недопустимы. Однако, когда $l=0$ и второй корень равен -1 , функцию можно пронормировать. Тем не менее и это значение должно быть исключено. Это видно уже из того обстоятельства, что система шредингеровских собственных функций является полной (т. е. с её помощью можно представить любое начальное состояние) и потому не допускает дальнейшего расширения.

Физическую причину этого мы видим в следующем. Если устранить особенность фигурирующего в задаче потенциала $V = -\frac{Ze^2}{r}$ (т. е. устремить Z к нулю), то должна исчезнуть и особенность волновой функции. Однако в нерелятивистской задаче ²⁾ при $l=-1$ это не имеет места. При $Z \rightarrow 0$ соответствующая волновая функция переходит в $\frac{a}{r}$, т. е. она попрежнему имеет особую точку при $r=0$. Это явно противоречит смыслу понятия

¹⁾ Значение $k = +1$ отвечает не только основному состоянию $1S$, но и вообще всем термам nS ; равным образом, $k = -1$ соответствует не только нижшему уровню $2P_{1/2}$, но и всем вообще термам $nP_{1/2}$. Например, в приведённой выше таблице речь идёт об уровнях с $n=3$.

²⁾ Рассматриваемое решение содержит ещё логарифмические члены (см. дополнение 2) и, если оно должно обращаться в нуль на бесконечности, отнюдь не соответствует целочисленным значениям энергетического параметра (II.1.9a). При $Z \rightarrow 0$ логарифмические члены исчезают и остаётся только первый член степенного ряда, не содержащего никаких логарифмов. Это и есть приведённая в тексте функция $\frac{a}{r}$.

собственной функции. Следовательно, решения такого типа должны быть исключены.

В противоположность этому в нашем релятивистском решении при $k = \pm 1$ показатель степени волновой функции при указанном выше предельном переходе стремится к нулю:

$$\eta \rightarrow 1 - 1 \quad \text{при} \quad Z \rightarrow 0,$$

и, таким образом, особая точка R_1 и R_2 исчезает.

Таким образом, накладывая, помимо условия нормировки, ещё дополнительное требование, чтобы при устранении особенности из волнового уравнения исчезала и особая точка собственной функции, мы оправдываем использование обращающихся при $\rho = 0$ в бесконечность радиальных функций R_1 и R_2 . Тем самым *допускаются собственные значения* $k = \pm 1$. Обращение собственной функции в бесконечность в данном случае оказывается лишь следствием «нефизической» схематизации закона сил. Если «обрезать» потенциал, исключив в нём особенность при $r = 0$, то и волновая функция не будет иметь особенности.

Аналогичные рассуждения показывают, далее, что значение $k = 0$ недопустимо. Действительно, при этом вместо (22) мы имеем:

$$\eta = 1 \pm i\alpha Z \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad Z \rightarrow 0. \quad (22a)$$

Это обстоятельство существенно для окончательного обоснования выбора допустимых значений k в (7.25).

С этой же точки зрения следует отклонить предложенную Темплом ¹⁾ теорию нейтрона. Действительно, использованное в указанной работе решение итерированного уравнения Дирака имеет особенность, не исчезающую при $Z \rightarrow 0$, и потому оно не является допустимым в качестве собственной функции.

Обратимся к последнему сомножителю в (21) — к полиномам P_1 и P_2 , для которых в § 7 мы получили выражения в виде оборванных рядов (7.41):

$$P_1 = \sum a_\nu \rho^\nu, \quad P_2 = \sum b_\nu \rho^\nu.$$

В принципе эти полиномы полностью определяются рекуррентными формулами (7.44). Однако, чтобы найти явное аналитическое представление P_1 и P_2 , удобнее вернуться к дифференциальным уравнениям (7.40), произведя в них замену переменных так, чтобы выделить из v_1 и v_2 множители ρ^ϵ . Мы получаем тогда:

$$\left. \begin{aligned} \rho P_1' + \left(-k + V - \frac{\rho}{2}\right) P_1 &= \left(\alpha Z + \frac{\rho}{2\epsilon}\right) P_2 \\ \rho P_2' + \left(+k + V - \frac{\rho}{2}\right) P_2 &= \left(-\alpha Z + \frac{\rho}{2}\right) P_1 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \epsilon, \\ 1. \end{array} \quad (23)$$

Здесь и в дальнейшем символ $\sqrt{\quad}$ означает положительное значение $\sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}$; ϵ — сокращённое обозначение (7.43).

Как указано в (23), умножим первое уравнение на ϵ , второе — на единицу, а затем почленно сложим и вычтем результаты. Положим при этом

$$P_2 + \epsilon P_1 = Q_1, \quad P_2 - \epsilon P_1 = Q_2, \quad (24)$$

¹⁾ G. Temple, Proc. Roy. Soc. A145, 344 (1934).

откуда

$$P_1 \pm \varepsilon P_2 = \frac{1 \pm \varepsilon^2}{2\varepsilon} Q_1 - \frac{1 \mp \varepsilon^2}{2\varepsilon} Q_2. \quad (25)$$

Тогда вместо (23) получаются более простые уравнения:

$$\left. \begin{aligned} \rho Q_1' + \left(V + \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon} - \rho \right) Q_1 &= q_1 Q_2, \\ \rho Q_2' + \left(V - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon} \right) Q_2 &= q_2 Q_1, \\ q_1 &= -k + \alpha Z \frac{1 + \varepsilon^2}{2\varepsilon}, \quad q_2 = -k - \alpha Z \frac{1 + \varepsilon^2}{2\varepsilon}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Поскольку правые части (26) не содержат ρ , от системы двух уравнений первого порядка для функций Q_1 или Q_2 легко перейти к одному дифференциальному уравнению второго порядка для Q_1 или Q_2 . Чтобы исключить Q_2 , достаточно, например, с помощью первого из уравнений (26) выразить Q_2 и Q_2' через Q_1 и результат подставить во второе из названных уравнений. Простое вычисление даёт:

$$\left. \begin{aligned} \rho Q_1'' + (2V + 1 - \rho) Q_1' - \left(V + 1 - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon} \right) Q_1 &= 0, \\ \rho Q_2'' + (2V + 1 - \rho) Q_2' - \left(V - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon} \right) Q_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Мы получили не что иное, как дифференциальное уравнение для «вырожденной гипергеометрической функции» [см. гл. II, § 2, уравнения (20) и (22)]. Действительно, если обозначить названную функцию посредством $F(a, c, \rho)$, то дифференциальное уравнение, которым она определяется, имеет вид:

$$\rho F'' + (c - \rho) F' - aF = 0.$$

Таким образом, мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} Q_1 &= 2\varepsilon F \left(V - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon} + 1, \quad 2V + 1, \rho \right), \\ Q_2 &= 2\varepsilon A F \left(V - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon}, \quad 2V + 1, \rho \right). \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Два последних аргумента в обеих функциях совпадают, первый же в Q_1 на единицу больше, чем в Q_2 . Множитель 2ε при F в функции Q_1 выбран произвольно, но он окажется удобным для дальнейшего. Константа A — отношение множителей при Q_1 и Q_2 — определяется из уравнений (26). Проще всего положить там $\rho = 0$, тогда, используя одно из этих уравнений (безразлично, первое или второе), мы находим:

$$-A = \frac{V + \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon}}{k - \alpha Z \frac{1 + \varepsilon^2}{2\varepsilon}} = \frac{k + \alpha Z \frac{1 + \varepsilon^2}{2\varepsilon}}{V - \alpha Z \frac{1 - \varepsilon^2}{2\varepsilon}}. \quad (28a)$$

Рассмотрение первого аргумента функции Q_1 или Q_2 позволяет нам по-новому прочесть формулу тонкой структуры. Именно, если гипергеометрический ряд обрывается на члене данной ступени n_r , то в соответствии с законом образования коэффициентов этого ряда величина $a + n_r$ должна обратиться в нуль, т. е. параметр a должен быть равен отрицательному целому числу $-n_r$.

В применении к Q_2 это условие даёт:

$$\sqrt{-\alpha Z \frac{1-\varepsilon^2}{2\varepsilon}} = -n_r, \quad (28б)$$

т. е.

$$n_r + \sqrt{-\alpha Z \frac{1-\varepsilon^2}{2\varepsilon}} = \frac{\alpha Z}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon} - \varepsilon \right). \quad (28в)$$

Но это есть не что иное, как равенство (7.48), из которого мы получили формулу тонкой структуры. Вместе с тем, пользуясь (28б) и (28в), можно упростить выражения для Q_1 и Q_2 . Именно, вместо (28) мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} Q_1 &= 2\varepsilon F(-n_r + 1, \quad 2\sqrt{-\alpha Z \frac{1-\varepsilon^2}{2\varepsilon}}, \quad \rho), \\ Q_2 &= 2\varepsilon A F(-n_r, \quad 2\sqrt{-\alpha Z \frac{1-\varepsilon^2}{2\varepsilon}}, \quad \rho). \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Q_2 представляет собой полином степени n_r , Q_1 — степени $n_r - 1$. Исходные же полиномы P_1 и P_2 оба имеют степень n_r , как и требовалось в § 7. Действительно, на основании (24) мы имеем:

$$P_1 = \frac{1}{2\varepsilon} (Q_1 - Q_2), \quad P_2 = \frac{1}{2} (Q_1 + Q_2). \quad (30)$$

Подставляя эти значения P_1 и P_2 в (21), мы получаем окончательные аналитические выражения для радиальных собственных функций R_1 и R_2 .

Рассмотрим в качестве примера простейший случай — основное состояние атома водорода ($n = 1$). Здесь $k = +1$ и в соответствии с (36) $n_r = 0$. В силу (29) отсюда следует: $Q_2 = 2\varepsilon A$. С другой стороны, из той же формулы (29) видно, что функция Q_1 в данном случае вообще не может быть представлена обрывающимся гипергеометрическим рядом (что мы обычно требовали). Действительно, её параметр a в данном случае отнюдь не является отрицательным целым числом, а наоборот, равен $+1$. Это обстоятельство, однако, не приводит ни к каким трудностям, так как стоящий при Q_2 множитель A оказывается бесконечно большим. В самом деле, при $n_r = 0$ знаменатель в формуле (28а) в силу (28б) обращается в нуль. Таким образом, величиной Q_1 можно пренебречь по сравнению с Q_2 , и мы получаем из (30):

$$P_1 = -A, \quad P_2 = \varepsilon A.$$

Отсюда на основании (21) и (21а) находим (включая константу A в нормировочный множитель N):

$$\left. \begin{aligned} R_1 \\ R_2 \end{aligned} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} -N \\ N\varepsilon \end{array} \right\} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^{-1+\sqrt{1-\varepsilon^2 Z}}, \quad \rho = \frac{2r}{\hbar c} \sqrt{E_0^2 - E^2}. \quad (31)$$

В нерелятивистском приближении $\alpha \rightarrow 0$, $\varepsilon \rightarrow 0$, и для R_1 получается известное выражение

$$R_1 = R = -N e^{-\frac{1}{2}\rho},$$

а R_2 [в согласии с (7.34)] обращается в нуль.

В заключение исследуем зависимость собственной функции ψ от величины γ , для чего будем исходить из представления (19).

Если по формуле (7.18) выразить показательные функции через синусы и косинусы, то оказывается, что первые два члена (19) содержат (и притом линейно) только гиперкомплексные единицы

$$1, \quad \gamma_{12}, \quad \gamma_{31}, \quad \gamma_{23}.$$

Таким образом, эта часть функции ψ принадлежит к группе кватернионов. В двух последующих слагаемых содержатся гиперкомплексные единицы, получающиеся из только что названных умножением на γ_3 :

$$\gamma_3, \gamma_{123}, \gamma_1, \gamma_2.$$

Совместно с предыдущими они образуют группу бикватернионов, к которой благодаря умножению справа на делитель нуля $1 + \gamma_4$ привелась исходная группа, построенная на всех 16 единицах.

Это приведение можно довести до конца, заменив в (19) $1 + \gamma_4$ на делитель нуля Γ из (5.30). Поскольку функция ψ ещё не нормирована, такая замена вполне возможна и не требует для своего обоснования никаких дальнейших рассуждений. Как мы знаем (см. стр. 210), при этом благодаря наличию в Γ множителя $1 + i\gamma_{12}$, число содержащихся в ψ гиперкомплексных единиц будет уменьшено ещё в два раза. Именно к этому мы и стремимся. Обозначая для краткости $(m + \frac{1}{2})\varphi$ [или соответственно $(m - \frac{1}{2})\varphi$] символом α , мы получим:

$$\left. \begin{aligned} e^{-i\alpha}(1 + i\gamma_{12}) &= (\cos \alpha - \gamma_{12} \sin \alpha)(1 + i\gamma_{12}) = \\ &= (\cos \alpha + i \sin \alpha)(1 + i\gamma_{12})e^{+i\alpha}(1 + i\gamma_{12}), \\ e^{i\alpha}\gamma_{31}(1 + i\gamma_{12}) &= \gamma_{31}e^{-i\alpha}(1 + i\gamma_{12}) = \gamma_{31}e^{+i\alpha}(1 + i\gamma_{12}). \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Как видно из (32), при таком приведении в собственную функцию впервые вводится мнимая единица, но зато γ_{12} исключается из показателей степени. Формула (19) принимает вид:

$$\psi = \left\{ \begin{aligned} & \left[\gamma_{31} P_{-k}^{m-\frac{1}{2}} e^{i(m-\frac{1}{2})\varphi} \left(-k - m + \frac{1}{2}\right) + \right. \\ & \quad \left. + P_{-k}^{m+\frac{1}{2}} e^{i(m+\frac{1}{2})\varphi} \right] R_1 - \\ & - \left[\gamma_{31} P_k^{m-\frac{1}{2}} e^{i(m-\frac{1}{2})\varphi} \left(k - m + \frac{1}{2}\right) + \right. \\ & \quad \left. + P_k^{m+\frac{1}{2}} e^{i(m+\frac{1}{2})\varphi} \right] \gamma_3 R_2, \end{aligned} \right\} \cdot \Gamma, \quad (33)$$

$$\Gamma = \frac{1}{4} (1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12}). \quad (33a)$$

Это представление во всех существенных чертах совпадает с данным Заутером¹⁾. В фигурных скобках здесь фигурируют только гиперкомплексные единицы из подгруппы кватернионов, построенной на γ_1 и γ_3 :

$$1, \gamma_1, \gamma_3, \gamma_{31}.$$

Каждая из них множится на функцию, не зависящую от величин γ ; эти функции мы обозначим через

$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4. \quad (34)$$

¹⁾ См. формулу (12) первой работы, цитированной на стр. 215. В качестве индекса шаровой функции у Заутера фигурирует не $-k$, а $k-1$ [в согласии с нашим условием в (7.24)]. Однако если пользоваться символом $-k$, то симметрия формулы выявляется гораздо ярче. Следует указать также на более позднюю работу Заутера в Zs. f. Phys. 97, 777 (1935).

Таким образом, вместо одной дираковской функции (33) можно говорить о четырёх функциях (34). Тем самым устанавливается связь с рассматриваемой в дополнении 13 обычной формулировкой теории Дирака, в которой волновые функции изображаются четырёхрядными матрицами. В этом смысле мы можем записать ψ в виде:

$$\psi = \{\psi_1 + \gamma_1\psi_2 + \gamma_3\psi_3 + \gamma_{31}\psi_4\} \Gamma. \quad (35)$$

Очевидно, функции ψ_1, \dots, ψ_4 зависят ещё от конкретного вида матриц, которые раз и навсегда выбираются для представления делителя нуля Γ , осуществляющего приведение полной группы гиперкомплексных единиц.

Так же как о четырёх дираковских функциях, обычно говорят о четырёх не содержащих величин γ дифференциальных уравнениях Дирака. С нашей точки зрения они получаются, если на делитель нуля помножить само уравнение Дирака (7.1):

$$[(\gamma, \text{grad})\psi + (\gamma_4 k_4 + k_0)\psi] \Gamma = 0. \quad (36)$$

В качестве ψ сюда надо подставить выражение (35). Прежде всего из выражения в квадратных скобках можно исключить γ_4 . Для этого надо перенести γ_4 направо от ψ и объединить с множителем $1 + \gamma_4$ в Γ :

$$\gamma_4(\psi_1 + \gamma_1\psi_2 + \gamma_3\psi_3 + \gamma_{31}\psi_4)\Gamma = \{\psi_1 - \gamma_1\psi_2 - \gamma_3\psi_3 + \gamma_{31}\psi_4\} \Gamma. \quad (36a)$$

Далее, слагаемое в квадратных скобках, содержащее γ_2 , можно преобразовать следующим образом:

$$\gamma_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \psi \Gamma = \frac{\partial}{\partial x_2} (\psi_1 - \gamma_1\psi_2 - \gamma_3\psi_3 + \gamma_{31}\psi_4) \gamma_2 \Gamma.$$

Представим величину γ_2 в виде:

$$\gamma_2 = -i\gamma_1(i\gamma_{12}),$$

и первый сомножитель введём под знак круглой скобки, а второй — внесём в Γ . Тогда получится:

$$-i \frac{\partial}{\partial x_2} (-\psi_2 + \gamma_1\psi_1 + \gamma_3\psi_4 - \gamma_{31}\psi_3) \Gamma.$$

Таким образом, вычисляя ещё выражения $\gamma_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1}$ и $\gamma_3 \frac{\partial \psi}{\partial x_3}$, мы получаем:

$$\begin{aligned} (\gamma, \text{grad})\psi \Gamma &= \frac{\partial}{\partial x_1} (\psi_3 + \gamma_1\psi_1 - \gamma_3\psi_4 - \gamma_{31}\psi_2) \Gamma - \\ &- i \frac{\partial}{\partial x_2} (-\psi_2 + \gamma_1\psi_1 + \gamma_3\psi_4 - \gamma_{31}\psi_3) \Gamma + \frac{\partial}{\partial x_3} (\psi_3 + \gamma_1\psi_4 + \gamma_3\psi_1 + \gamma_{31}\psi_2) \Gamma. \end{aligned} \quad (36b)$$

Приравняв нулю в отдельности коэффициенты при 1, γ_1 , γ_3 , γ_{31} , получаем из (36) и (36b):

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_3 + (k_4 + k_0) \psi_1 &= 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi_1 + \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_4 + (-k_4 + k_0) \psi_2 &= 0, \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi_4 + \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_1 + (-k_4 + k_0) \psi_3 &= 0, \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi_3 + \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_2 + (k_4 + k_0) \psi_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Таким образом, задача действительно свелась к системе четырёх дифференциальных уравнений, не содержащих величин γ . Отсюда определяются неизвестные функции ψ_1, \dots, ψ_4 . При этом в соответствии с (7.2) следует положить в (37):

$$\left. \begin{aligned} k_4 + k_0 &= \frac{1}{\hbar c} (E_0 - E + V), \\ -k_4 + k_0 &= \frac{1}{\hbar c} (E_0 + E - V). \end{aligned} \right\} \quad (37a)$$

Аналогичные уравнения получаются и в общем случае, когда присутствует векторный потенциал и силы зависят от времени (при этом только войдут ещё производные $\frac{\partial}{\partial x_4}$). Однако эти уравнения трудно обозримо и к тому же их вид зависит от специального выбора делителя нуля Γ (или, что то же самое, от выбора матриц, представляющих величины γ); выбор же этот можно осуществить весьма разнообразными способами. Именно по этой причине мы предпочли, следуя Заутеру, оперировать с абстрактными величинами γ , лишь в самом конце производя приведение их.

§ 9. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ И НОРМИРОВКА. ПРАВИЛА ОТБОРА

Запишем решение уравнения Дирака в виде (8.35), подставляя в качестве ψ_1, \dots, ψ_4 их значения из (8.33). При этом для удобства мы будем впредь вместо P_{-k} (при $k > 0$, см. стр. 234) писать P_{k-1} и введём вещественный, не содержащий величин γ нормирующий множитель N . Мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} \psi &= N \{ \psi_1 + \gamma_1 \psi_2 + \gamma_3 \psi_3 + \gamma_{31} \psi_4 \} \Gamma. \\ \psi_1 &= P_{k-1}^{m+\frac{1}{2}} e^{i(m+\frac{1}{2})\varphi} R_1, \\ \psi_2 &= \left(k - m + \frac{1}{2} \right) P_k^{m-\frac{1}{2}} e^{i(m-\frac{1}{2})\varphi} R_2, \\ \psi_3 &= -P_k^{m+\frac{1}{2}} e^{i(m+\frac{1}{2})\varphi} R_2, \\ \psi_4 &= \left(-k - m + \frac{1}{2} \right) P_{k-1}^{m-\frac{1}{2}} e^{i(m-\frac{1}{2})\varphi} R_1. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Здесь R_1 и R_2 суть вещественные и не содержащие множителей γ функции, определяемые формулами (8.21), (8.30) и (8.29); под Γ понимается нормированный к единице, самосопряжённый делитель нуля (5.30), в котором сомножители коммутируют друг с другом. Волновая функция $\bar{\psi}$, сопряжённая с ψ , составляется по правилам (3.10а, б): в $\bar{\psi}$ изменяется на обратный порядок следования множителей γ и изменяются знаки у i , γ_1 , γ_2 , γ_3 . Таким образом,

$$\bar{\psi} = N\Gamma \{ \psi_1^* - \gamma_1 \psi_2^* - \gamma_3 \psi_3^* + \gamma_{31} \psi_4^* \}. \quad (3)$$

В основу всего последующего полагается четырёхмерный вектор (3.6):

$$S_\alpha = v \gamma_\alpha u, \quad (4)$$

определяющий в соответствии с (3.14) ток и плотность частиц:

$$j\Gamma = ic(S_1, S_2, S_3), \quad \rho\Gamma = S_4. \quad (4a)$$

Зависящие от времени волновые функции u и v , фигурирующие в (4), могут принадлежать, вообще говоря, различным (но стационарным) состояниям. Положим:

$$u = \psi e^{-i\omega_1 t}, \quad v = \bar{\chi} e^{+i\omega_2 t}, \quad (5)$$

где функция ψ даётся формулами (1) и (2), а χ — выражением (3), в котором только надо заменить $\psi_1^*, \dots, \psi_4^*$ на $\chi_1^*, \dots, \chi_4^*$. Нормирующие множители при функциях ψ и χ обозначим соответственно через N_1 и N_2 .

Выражения для тока и плотности, которые получаются в результате приведения, уже выписывались нами в § 5 [формулы (36) — (39)]. Опуская временной множитель $e^{i(\omega_2 - \omega_1)t}$ и делитель нуля Γ , мы имеем в соответствии с (5.36) и (5.39):

$$\rho = N_1 N_2 (\chi_1^* \psi_1 + \chi_2^* \psi_2 + \chi_3^* \psi_3 + \chi_4^* \psi_4), \quad (6)$$

$$j_3 = ic N_1 N_2 (\chi_1^* \psi_3 - \chi_3^* \psi_1 - \chi_2^* \psi_4 + \chi_4^* \psi_2). \quad (7)$$

Далее, комбинируя подходящим образом (5.37) и (5.38), находим:

$$\left. \begin{aligned} j_1 + ij_2 &= -2ic N_1 N_2 (\chi_2^* \psi_1 + \chi_4^* \psi_3), \\ j_1 - ij_2 &= 2ic N_1 N_2 (\chi_1^* \psi_2 + \chi_3^* \psi_4). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Из структуры этих формул явствует, что если поменять местами χ и ψ (т. е. начальное и конечное состояния), то

$$\rho \rightarrow \rho^*, \quad j_3 \rightarrow j_3^*, \quad j_1 \pm ij_2 \rightarrow (j_1 \mp ij_2)^*. \quad (9)$$

В частности, отсюда следует, что при совпадающих ψ и χ функции ρ , j_1 , j_2 , j_3 вещественны (как это уже указывалось на стр. 213).

Основываясь на формуле (6), мы получаем, смотря по тому, различны функции ψ и χ или нет, условия ортогональности и нормировки собственных функций. Первое из них в соответствии с (3.9) имеет вид:

$$\int \rho d\tau = 0. \quad (10)$$

Исследуем его подробнее, рассматривая по отдельности содержащиеся в $d\tau$ интегралы по φ , $x = \cos \vartheta$ и r .

а) Пусть зависимость функций ψ и χ от угла φ характеризуется квантовыми числами m_1 и m_2 , причём $m_1 \neq m_2$. Тогда во всех четырёх слагаемых в (6) содержится множитель

$$e^{i(m_1 - m_2)\varphi},$$

который даёт нуль при интегрировании по φ . Таким образом, в данном случае выполнение условия (10) обеспечивается зависимостью ψ и χ от φ .

б) Пусть теперь $m_1 = m_2$, но $k_1 \neq k_2$. Тогда в (6) будут содержаться произведения

$$P_{k_1}^{\mu}(x) P_{k_2}^{\mu}(x) \quad \text{или} \quad P_{k_1-1}^{\mu}(x) P_{k_2-1}^{\mu}(x), \quad \mu = m \mp \frac{1}{2},$$

которые дают нуль при интегрировании по x в пределах от -1 до $+1$. Следовательно, в данном случае выполнение условия (10) обеспечивается благодаря зависимости ψ и χ от угла ϑ .

в) Положим теперь $m_1 = m_2$, $k_1 = k_2$, но будем считать различными квантовые числа n , характеризующие радиальные части функций ψ и χ

(в отличие от R_1 и R_2 радиальные функции, соответствующие χ , обозначим через T_1 и T_2). Тогда

$$\int \rho d\tau = 2\pi N_1 N_2 \left\{ (p_1 + p_4) \int T_1 R_1 r^2 dr + (p_2 + p_3) \int T_2 R_2 r^2 dr \right\},$$

где

$$p_1 = \int [P_{k-1}^{m-\frac{1}{2}}(x)]^2 dx, \quad p_4 = \int [P_{k-1}^{m-\frac{1}{2}}(x)]^2 dx \left(-k-m+\frac{1}{2}\right)^2,$$

$$p_2 = \int [P_k^{m-\frac{1}{2}}(x)]^2 dx \left(k-m+\frac{1}{2}\right)^2, \quad p_3 = \int [P_k^{m+\frac{1}{2}}(x)]^2 dx.$$

На основании (1.9.30) мы имеем:

$$\int_{-1}^{+1} [P_l^m]^2 dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!},$$

откуда после простого преобразования факториалов находим:

$$p_1 + p_4 = p_2 + p_3 = 2 \frac{\left(k+m-\frac{1}{2}\right)!}{\left(k-m-\frac{1}{2}\right)!}.$$

Таким образом,

$$\int \rho d\tau = 4\pi N_1 N_2 \frac{\left(k+m-\frac{1}{2}\right)!}{\left(k-m-\frac{1}{2}\right)!} \int_0^\infty (T_1 R_1 + T_2 R_2) r^2 dr. \quad (11)$$

Отсюда на основании (10) мы получаем следующее условие ортогональности радиальных дираковских функций при одинаковых m и k :

$$\int_0^\infty (T_1 R_1 + T_2 R_2) r^2 dr = 0. \quad (12)$$

г) Пусть теперь совпадают и радиальные квантовые числа, так что $T_1 = R_1$, $T_2 = R_2$ и $N_1 = N_2 = N$. Тогда равенство (10) следует заменить условием нормировки (3.12):

$$\int \rho d\tau = 1. \quad (13)$$

Разобьем нормировочный множитель N на два сомножителя, один из которых $N_{\theta, \varphi}$ обусловлен угловой зависимостью функции ψ , а другой N_r — радиальной. Тогда в силу (11) и (13) мы получаем:

$$N_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{\left(k-m-\frac{1}{2}\right)!}{\left(k+m-\frac{1}{2}\right)!}; \quad N_r^2 \int_0^\infty (R_1^2 + R_2^2) r^2 dr = 1. \quad (14)$$

В дополнении 8, пользуясь методом Крамерса, мы вычислим N_r для случая непрерывного спектра. Непосредственное вычисление с использованием представления R_1 и R_2 в виде гипергеометрических функций оказывается довольно утомительным¹⁾ (см., в частности, формулу (38) цитируемой работы).

¹⁾ К. Вечерт, Ann. d. Phys. 6, 700 (1930).

При выводе формулы (11) мы считали k положительным. Если $k < 0$, то вместо k в качестве индекса шаровой функции будет фигурировать $|k| - 1$, а вместо $k - 1 - |k|$; множители же $\pm k - m + \frac{1}{2}$ в (2) останутся без изменения. В результате в формуле (11) [а потому и в (14)] вместо k появится $|k|$.

Сделаем ещё одно замечание о сферической симметрии плотности ρ в S - и $P_{1/2}$ -состояниях [первое из названных обстоятельств известно нам ещё из теории Шредингера (см. стр. 82), но о втором нельзя даже говорить в рамках теории, пренебрегающей спиновым расщеплением]. S - и $P_{1/2}$ -термы соответствуют следующим квантовым числам [см. таблицу на стр. 242 и формулы (8.20)]:

	k	l	j	m
S -терм	+1	0	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$
$P_{1/2}$ -терм	-1	1	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$

Пользуясь этими значениями и полагая $\chi = \psi$, мы получаем из (2) и (6) (для определённости принимаем $m = +\frac{1}{2}$):

$$\rho_S = [P_0^1]^2 R_1^2 + [P_1^0]^2 R_2^2 + [P_1^1]^2 R_3^2 + [P_0^0]^2 R_1^2,$$

$$\rho_P = [P_1^1]^2 R_1^2 + [P_0^0]^2 R_3^2 + [P_0^1]^2 R_1^2 + [P_1^0]^2 R_1^2.$$

Но

$$P_0^0 = 1, \quad P_1^0 = 0, \quad [P_0^1]^2 + [P_1^1]^2 = \cos^2 \vartheta + \sin^2 \vartheta = 1,$$

и потому

$$\rho_S = \rho_P = R_1^2 + R_3^2,$$

т. е. зависит только от r . То же самое получается и при $m = -\frac{1}{2}$.

Перейдём теперь к *правилам отбора*. В соответствии с общим методом гл. I [формула (1.8.13)] надо вычислить вектор-потенциал A , созданный данным распределением токов. Интересуясь только собственными функциями, принадлежащими дискретному спектру (случай A на стр. 57), мы вправе пренебречь «фактором запаздывания». Однако мы не будем [как в (1.8.17)] переходить к матричным элементам, работать с которыми в теории Дирака формально сложнее, чем с компонентами A . Последние, в силу (1.8.13), пропорциональны

$$\int j d\tau, \quad j = j_1, j_2, j_3, \quad \gamma = \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3. \quad (15)$$

Займёмся сначала третьей составляющей (15), двигаясь шаг за шагом, как и при рассмотрении условия ортогональности.

а) Пусть состояния ψ и χ характеризуются квантовыми числами m_1 и m_2 . Тогда зависимость всех четырёх слагаемых в (7) от φ даётся одним и тем же множителем

$$e^{i(m_1 - m_2)\varphi}.$$

При интегрировании по φ это даёт нуль. Следовательно, должно быть

$$m_1 = m_2, \quad \text{т. е.} \quad \Delta m = 0. \quad (16)$$

б) Пусть теперь $m_1 = m_2$; числа k_1 и k_2 будем пока считать положительными. В формулу (7) входят произведения вида

$$P_{k_1-1}^{\mu} P_{k_2}^{\mu} \text{ или } P_{k_2-1}^{\mu} P_{k_1}^{\mu}, \quad \mu = m \pm \frac{1}{2}. \quad (17)$$

При интегрировании (17) по $x = \cos \vartheta$ отличный от нуля результат получается, только если

$$k_2 = k_1 \pm 1, \quad \text{т. е. } \Delta k = \pm 1. \quad (18)$$

в) Положим $m_1 = m_2$, $k_1 = k$, $k_2 = k + 1$; радиальные функции, соответствующие χ , обозначим попеременно через T_1 и T_2 . В данном случае при интегрировании по x второе и третье слагаемые в (7) дают нуль, так как содержат шаровые функции с различными нижними индексами. В другие же два слагаемых входят одинаковые шаровые функции; поэтому мы получаем:

$$\int J_3 d\tau = -\frac{8\pi i c N_1 N_2}{2k+1} \frac{(k+m+\frac{1}{2})!}{(k-m-\frac{1}{2})!} \int T_1 R_2 r^2 dr. \quad (19)$$

Эта формула справедлива для переходов $k \leftrightarrow k+1$. Вероятность другого, возможного согласно (18), перехода $k \leftrightarrow k-1$ получится отсюда заменой k на $k-1$.

г) Результаты пункта б) ещё не являются полными, так как мы предполагаем k_1 и k_2 положительными. Если k_1 и k_2 оба отрицательны, то формулы (18) остаются в силе, только надо заменить k на $|k|-1$. Однако может случиться, что, например, $k_2 < 0$, $k_1 > 0$. Тогда произведения (17) надо писать в виде:

$$P_{k_1-1}^{\mu} P_{|k_2|-1}^{\mu} \text{ и } P_{|k_1|}^{\mu} P_{k_2}^{\mu}, \quad \mu = m \pm \frac{1}{2}.$$

При интегрировании этих выражений по x отличный от нуля результат получается, если

$$|k_1| = |k_2|, \quad \text{т. е. } \Delta |k| = 0. \quad (18a)$$

(В такой форме записи одновременно учтён и другой возможный случай: $k_1 < 0$, $k_2 > 0$.) Вместо (19) мы получаем теперь:

$$\int J_3 d\tau = -8\pi i c m N_1 N_2 \frac{(|k|+m+\frac{1}{2})!}{(|k|-m-\frac{1}{2})!} \times \\ \times \left\{ \frac{1}{2|k|-1} \int T_2 R_1 r^2 dr + \frac{1}{2|k|-1} \int T_1 R_2 r^2 dr \right\}. \quad (19a)$$

Прежде чем переходить к обсуждению полученных результатов, рассмотрим еще, что дают компоненты J_1 и J_2 , взятые в комбинации $J_1 \pm iJ_2$ [уравнение (8)].

а') Зависимость обоих слагаемых в (8) от угла φ определяется одним и тем же множителем

$$e^{i(m_1 - m_2 \pm 1)\varphi}$$

(верхний знак — для первого уравнения (8), нижний — для второго).

Следовательно, интегрирование по φ даёт отличный от нуля результат лишь при условии

$$m_2 = m_1 \pm 1, \quad (20)$$

причём верхний знак относится к первой из формул (8), нижний — ко второй.

б') Пусть k_1 и k_2 положительны; $m_1 = m$, $m_2 = m + 1$. В формулах (8) фигурируют следующие произведения:

$$P_{k_1}^\mu P_{k_1-1}^\mu, \quad P_{k_2-1}^\mu P_{k_2}^\mu, \quad \mu = m \pm \frac{1}{2}.$$

При интегрировании по x не исчезают только те из них, в которых

$$k_2 = k_1 \mp 1, \quad \text{т. е. } \Delta k = \pm 1. \quad (21)$$

Здесь двойной знак относится к обеим формулам (8).

в') Положим $m_1 = m$, $m_2 = m + 1$, $k_1 = k$, $k_2 = k + 1$. Из первой формулы (8) мы получаем (принимая во внимание, что одно из слагаемых даёт нуль при интегрировании по x):

$$\int (j_1 + ij_2) d\tau = -\frac{8\pi ic N_1 N_2}{2k+1} \cdot \frac{(k+m+\frac{3}{2})!}{(k-m-\frac{1}{2})!} \int T_1 R_2 r^2 dr. \quad (22)$$

Аналогично вторая из формул (8) даёт (при $m_1 = m$, $m_2 = m - 1$):

$$\int (j_1 - ij_2) d\tau = \frac{8\pi ic N_1 N_2}{2k+1} \cdot \frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{(k-m-\frac{1}{2})!} \int T_1 R_2 r^2 dr. \quad (22a)$$

Для других возможных по (21) переходов в этих формулах следует поменять местами k и $k - 1$.

г') Если оба числа k_1 и k_2 отрицательны, то сохраняется в силе правило, данное в пункте г) (замена k на $|k| - 1$). Если же k_1 и k_2 имеют различные знаки, то справедливо правило отбора (18а), а не (21). В этом случае мы получаем:

$$\int (j_1 + ij_2) d\tau = 4\pi ic N_1 N_2 \frac{(k+m+\frac{1}{2})!}{(k-m-\frac{3}{2})!} \int \left(\frac{T_1 R_2}{2k+1} + \frac{T_2 R_1}{2k-1} \right) r^2 dr, \quad (23)$$

$$\int (j_1 - ij_2) d\tau = 4\pi ic N_1 N_2 \frac{(k+m-\frac{1}{2})!}{(k-m-\frac{1}{2})!} \int \left(\frac{T_1 R_2}{2k+1} + \frac{T_2 R_1}{2k-1} \right) r^2 dr. \quad (23a)$$

Резюмируем теперь всё, что мы узнали до сих пор о правилах отбора.

Для магнитного квантового числа m правила отбора (16) и (20) оказываются такими же, как и в теории Шредингера (II.5.2а), а именно:

$$\Delta m = 0 \quad \text{или} \quad \Delta m = \pm 1. \quad (24)$$

Равным образом остаются в силе и прежние утверждения относительно поляризации излучения (определяющейся тем, к каким составляющим относятся формулы (24); только здесь идёт речь о компонентах вектор-потенциала, а в теории Шредингера — о матричных элементах). То обстоятельство, что в данном случае числа m_1 и m_2 — полуцелые, никак не

сказывается на правилах отбора, так как в последние входит лишь разность Δm .

Далее, правила отбора (18), (21) для дираковского азимутального квантового числа k совпадают с прежними правилами (II.5.2) для l , коль скоро k_1 и k_2 имеют одинаковые знаки. Действительно, тогда, в силу (8.2), $k = l + 1$ (при $k > 0$) и $-k = l$ (при $k < 0$), так что в обоих случаях мы имеем:

$$\Delta k = \Delta l = \pm 1. \quad (25)$$

Однако, кроме (18) и (21), появляется ещё новое правило отбора (18а), о котором в теории Шредингера нельзя было бы даже поставить вопроса, так как там азимутальные квантовые числа всегда положительны. Речь идёт о комбинации состояний с *различными* знаками k_1 и k_2 . В этом случае мы имеем:

$$\Delta |k| = 0. \quad (25a)$$

Будучи переписано в терминах азимутального квантового числа l , равенство (25а) приводит, как мы сейчас покажем, к прежнему условию $\Delta l = \pm 1$. Однако различие между (25) и (25а) выявляется, если кроме l ввести ещё квантовое число j , характеризующее полный момент количества движения. Положим в соответствии с (8.12)

$$j = |k| - \frac{1}{2}. \quad (26)$$

Тогда

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{при } k > 0,$$

$$j = l - \frac{1}{2} \quad \text{при } k < 0.$$

В случае (25) из условия $\Delta l = \pm 1$ отсюда следует (как при положительном, так и при отрицательном k) $\Delta j = \pm 1$. В случае (25а) положение иное. Пусть, например, $k_1 = k > 0$, $k_2 = -k < 0$. Тогда $l_1 + 1 = k = l_2$, и мы получаем попрежнему:

$$\Delta l = l_2 - l_1 = 1,$$

но вместе с тем, в силу (26), $j_1 = j_2 = k - \frac{1}{2}$ и, следовательно,

$$\Delta j = 0.$$

Аналогично, хотя в случае $k_1 = -k < 0$, $k_2 = k > 0$ Δl оказывается равным -1 , для j попрежнему получается:

$$\Delta j = 0.$$

Соответственно вместо (25) и (25а) можно написать также:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = \pm 1, \quad (27)$$

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0. \quad (27a)$$

Таким образом, для чуждого теории Шредингера квантового числа j получаются следующие правила отбора:

$$\Delta j = \pm 1 \quad \text{или} \quad \Delta j = 0, \quad (27b)$$

причём последняя возможность соответствует переходу $\Delta |k| = 0$ [(25а)], и обусловлена двойным знаком k в теории Дирака.

Рассмотренные здесь правила отбора и квантовые числа лежат в основе всей теории спектральных дублетов, а следовательно, также и рентгеновских спектров атомов. Действительно, всё изложенное справедливо не только для атома водорода, но и для любой одноэлектронной задачи с произвольным потенциалом $V(r)$. Более того, мы знаем из т. I, гл. VIII, что эти правила отбора сохраняют свою силу и для мультиплетных спектров.

Одновременно с правилами отбора в наших формулах содержатся и *правила интенсивности* спектральных линий (по крайней мере, для дублетных спектров). Однако вычисление их завело бы нас слишком далеко. Поэтому мы отошлём читателя к т. I, гл. VIII, § 9, где приведены окончательные волномеханические формулы для интенсивностей спектральных линий в любых мультиплетах. Следует только сделать одно замечание для объяснения целочисленного характера отношений интенсивностей. Дело в том, что различные переходы внутри данного мультиплета отличаются друг от друга только угловыми квантовыми числами (k, j и, может быть, m); радиальные же квантовые числа n_r и, следовательно, радиальные собственные функции начального и конечного состояний для них совпадают. Интенсивности линий определяются нашими формулами (19), (19а) и т. д. Но последние рационально зависят от угловых квантовых чисел; трансцендентная же зависимость от радиальных квантовых чисел для всех членов мультиплета одна и та же [это справедливо и для (19а), как показывает более подробное исследование]. Следовательно, она выпадает при вычислении отношений интенсивностей, которые, таким образом, оказываются целыми числами.

§ 10. НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР ВОДОРОДА. ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ УРОВНИ ЭНЕРГИИ. ОТКРЫТИЕ ПОЗИТРОНА

До сих пор предполагалось, что $E < E_0$. Это означало, что мы рассматриваем связанные состояния электрона (энергия связи $W \doteq E_0 - E$). Рассмотрим теперь свободный электрон, движущийся в поле ядра водородного атома ($E > E_0$). При этом в части, касающейся угловой зависимости, метод интегрирования § 7 остаётся в полной силе. Различие впервые возникает в связи с асимптотическим поведением радиальных собственных функций [см. (7.36)]. Именно, теперь величина λ из (7.37) оказывается мнимой, и потому равным образом допустимы как положительное, так и отрицательное значения корня:

$$\lambda = \pm \frac{i}{\hbar c} \sqrt{E^2 - E_0^2}. \quad (1)$$

Положим, как и в (7.38), $\rho = 2\lambda r$, выбрав при этом верхний знак у λ . Тогда

$$\rho = 2ixr, \quad x = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{E^2 - E_0^2}. \quad (1a)$$

Здесь x представляет собой *волновое* число, которое соответствовало бы энергии E в случае свободного движения. (Мы пишем x , а не k , так как последнее обозначение надо сохранить для дираковского азимутального квантового числа.) Действительно, при $V=0$ из формулы (1.4) для энергии вытекает:

$$p = \hbar x = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - E_0^2}. \quad (2)$$

Представляя, попрежнему, радиальные собственные функции в виде (7.39), мы получим для v_1 и v_2 прежние уравнения (7.40). Следовательно, поведение

собственных функций в нуле, как и раньше, определяется множителем ρ^1 , причём γ даётся формулой (7.42) (с положительным значением квадратного корня). Таким образом, и в данном случае γ оказывается вещественным числом, которое, вообще говоря, положительно и лишь при $k=1$ принимает небольшое по абсолютной величине отрицательное значение. Однако оборвать ряды для v_1 и v_2 теперь уже невозможно. Поэтому ряды в (7.41) не сводятся к полиномам, а представляют собой трансцендентные функции. Именно, как видно из (8.29), мы имеем здесь вырожденные (конфлюэнтные) гипергеометрические ряды.

Можно сказать, что в смысле угловой зависимости набор собственных функций остаётся дискретным и при $E > E_0$; квантовые числа m и k в этом случае имеют тот же смысл, что и при $E < E_0$. Но в смысле радиальной зависимости собственные функции образуют непрерывную последовательность: все значения энергии $E \geq E_0$ являются дозволенными.

Однако доволнены не только положительные, но и отрицательные значения энергии

$$E \leq -E_0.$$

Таким образом, мы имеем две отделённые друг от друга зоны дозволенных значений энергии, простирающиеся соответственно от $-\infty$ до $-E_0$ и от $+E_0$ до $+\infty$. Заметим, что отсюда не вытекает существование отрицательных значений энергии в дискретном спектре.

При изменении знака E величина v в (7.43) превращается в $1/v$, в результате чего правая часть уравнения (7.48) (положительная при $E > 0$) становится отрицательной. Но это обстоятельство несовместимо с положительным значением n_r . Таким образом, дискретных уровней с отрицательной энергией не существует¹⁾. Отвлекаясь от всех деталей тонкой структуры, схему уровней можно изобразить в виде, показанном на рис. 16. Аналогичная схема справедлива и для релятивистского уравнения Шредингера (§ 1) (там только подуровни тонкой структуры располагаются иначе, чем в теории Дирака). Вычёркивая из рис. 16 дискретные состояния, мы приходим, естественно, к схеме уровней для свободного электрона (причём она оказывается одной и той же как в случае уравнения Дирака, так и для релятивистского уравнения Шредингера).

Как показано в левой части рисунка, расстояние между зонами составляет около миллиона электрон-вольт. Действительно, если заряд электрона $e = 1,6 \cdot 10^{-21}$ электромагнитных единиц, а $2E_0 = 2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-27} \cdot 9 \cdot 10^{20} = 16 \cdot 10^{-7}$ эрг, то из условия

$$eV = 2E_0$$

следует:

$$V = 10^{14} \frac{\text{эрг}}{\text{заряд}} = 10^6 \text{ вольт.} \quad (3)$$

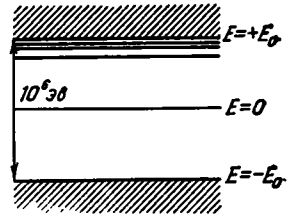


Рис. 16. Энергетический спектр атома водорода. Масштаб не выдержан, так как при этом все дискретные уровни практически совпадали бы с границей дискретного спектра E_0 .

¹⁾ Забегая несколько вперёд, этот факт можно истолковать следующим образом: электрон с отрицательной энергией ведёт себя, как позитрон, и, в частности, отталкивается от ядра. Но дискретные состояния возможны только, если электрон притягивается к ядру.

Если представить себе, что эта энергия испускается в виде монохроматических квантов

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = 2E_0,$$

то для длины волны излучения мы получим:

$$\lambda = \frac{1}{2} \frac{h}{m_0 c} = \frac{1}{2} \lambda_c \sim 12X, \quad (3a)$$

где λ_c — комптоновская длина волны. Для сравнения приведём здесь длины волн наиболее жёстких γ -лучей:

RaC	ThC''
$\lambda = 6,9$ и $5,6X$	$\lambda = 4,7X$
$V = 1,8 \cdot 10^6$ и $2,2 \cdot 10^6$ в	$V = 2,65 \cdot 10^6$ в

Само по себе появление отрицательных энергий не должно нас удивлять, ибо они имеются уже в релятивистской механике точки. В самом деле, при заданном импульсе p из уравнения (2) однозначно определяется только величина $E^2 - E_0^2$; для самой же энергии E получается двузначное выражение

$$E = \pm \sqrt{E_0^2 + c^2 p^2}.$$

Поэтому и в релятивистской механике точки возможные значения энергии даются *обеими* зонами рис. 16. В конечном счёте эта двузначность обусловлена, разумеется, наличием корня $\sqrt{1 - \beta^2}$, т. е. она восходит к самым основам теории относительности (к преобразованию Лоренца).

Однако в классической релятивистской механике дозволенные зоны энергии отделены друг от друга, и никакие переходы между ними невозможны. В релятивистской волновой механике такие переходы могут осуществляться. В течение нескольких лет это обстоятельство казалось серьёзной трудностью теории Дирака, пока, наконец, не выяснилось, что наличие переходов между состояниями отрицательной и положительной энергии с необходимостью вытекает из ряда экспериментальных фактов.

Прежде чем мы сможем рассмотреть это более подробно, надо несколько глубже изучить природу собственных функций непрерывного спектра.

Вернёмся к формуле (8.33), изображающей собственные функции в уже приведённой форме, и, вводя необходимый нормирующий множитель N , перепишем её в виде:

$$\psi = N \left[\left\{ \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} R_1 - \left\{ \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \gamma_3 R_2 \right] \Gamma. \quad (4)$$

В фигурных скобках здесь стоят в точности те же выражения, что и в соответствующих местах формулы (8.33). Равным образом можно воспользоваться и известными уже аналитическими выражениями для R_1 и R_2 [(8.21), (8.20), (8.29)]. Мы имеем:

$$\left. \begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \end{array} \right\} = e^{-\frac{1}{2} \rho} \rho^{-1+V} \left\{ \begin{array}{l} F_1 - AF, \\ e(F_1 + AF), \end{array} \right. \quad (4a)$$

где $V = \sqrt{k^2 - a^2 z^2}$, константа A даётся формулой (8.28a):

$$\left. \begin{array}{l} F = F(-n_r, 2\sqrt{+1}, \rho), \\ F_1 = F(-n_r + 1, 2\sqrt{+1}, \rho). \end{array} \right\} \quad (46)$$

Следует только иметь в виду, что в данном случае величины ρ и ε являются чисто мнимыми, а число n_r в соответствии с (8.28б) — комплексное. Помимо n_r мы будем пользоваться также и числом $n = n_r + \sqrt{V}$. В непрерывном спектре эта величина, заменяющая здесь главное квантовое число, является, в силу (8.28в), чисто мнимой; при этом в соответствии с условием, принятым в уравнении (1), она имеет отрицательную мнимую часть в области положительных энергий и положительную — в области отрицательных энергий.

Функции F и F_1 удобнее всего представить в виде интегралов по двойным петлям [см. дополнение 16, формулу (7)]:

$$\left. \begin{aligned} F &= C \oint u^{-n_r-1} (1-u)^{2V+n_r} e^{\rho u} du, \\ F_1 &= C_1 \oint u^{-n_r} (1-u)^{2V+n_r-1} e^{\rho u} du. \end{aligned} \right\} \quad (4в)$$

Константы C и C_1 определяются формулами (6) дополнения 16, причём там надо положить

$$\alpha = -n_r, \quad \gamma = 2\sqrt{V} + 1 \text{ и соответственно } \alpha = -n_r + 1, \quad \gamma = 2\sqrt{V} + 1.$$

Рассмотрим прежде всего вопрос о вещественности радиальных собственных функций. В то время как в дискретном спектре R_1 и R_2 были по-настоящему вещественны, в непрерывном спектре они являются вещественными «в существенной части», т. е. с точностью до (общего для них обоих) постоянного фазового множителя. В этом можно убедиться, полагая $\rho = 0$. Тогда

$$F = F_1 = 1, \quad e^{-\frac{1}{2}\rho} = 1, \quad \rho^{-1+V} = |\rho|^{-1+V} e^{\frac{i\pi}{2}(-1+V)}, \quad \varepsilon = |\varepsilon| e^{\frac{i\pi}{2}}.$$

Поэтому (мы выписываем явно только невещественные множители)

$$R_1 \sim e^{\frac{i\pi}{2}(-1+V)} (1-A), \quad R_2 \sim e^{\frac{i\pi}{2}V} (1+A). \quad (5)$$

Но $|A| = 1$ в силу (8.28а). Действительно, рассмотрим, например, первое из данных там представлений. Квадрат абсолютной величины числителя будет (ε — чисто мнимая величина, поэтому $\varepsilon^2 = -|\varepsilon|^2$):

$$k^2 - \alpha^2 Z^2 + \alpha^2 Z^2 \frac{(1+|\varepsilon|^2)^2}{4|\varepsilon|^2} = k^2 + \alpha^2 Z^2 \frac{(1-|\varepsilon|^2)^2}{4|\varepsilon|^2},$$

а это как раз совпадает с квадратом модуля знаменателя. Таким образом, можно написать:

$$A = e^{-2i\alpha}, \quad (5а)$$

и тогда формулы (5) принимают вид:

$$\left. \begin{aligned} R_1 &\sim 2e^{\frac{i\pi}{2}(-1+V)+i\alpha} \cos \alpha, \\ R_2 &\sim 2e^{\frac{i\pi}{2}(-1+V)+i\alpha} \sin \alpha. \end{aligned} \right\} \quad (5б)$$

Однако, поскольку дифференциальные уравнения (7.33) линейны и коэффициенты в них вещественны, из поведения функций R_1 и R_2 в нуле следует их «вещественность в существенной части» во всей области определения, причём фазовый множитель будет тем же самым, что и в (5б). Мы дополнительно убедимся в этом, исследовав в дополнении 16 [формула (15)] асимпто-

тическое поведение R_1 и R_2 . Там будет независимыми путём получен тот же самый фазовый множитель.

Перейдём теперь к определению нормирующего множителя N в формуле (4). Как и раньше, расщепим его на два сомножителя: $N_{\theta, \varphi}$ и N_r . Значение первого из них даётся формулой (9.14); относительно же N_r следует заметить, что по соображениям сходимости в непрерывном спектре вместо фигурирующего в (9.14) интеграла

$$\int_0^{\infty} (R_1^2 + R_2^2) r^2 dr \quad (6)$$

надлежит в соответствии с (II.8.10a) рассматривать выражение

$$X = \lim_{r_g \rightarrow \infty} \int_0^{r_g} r^2 dr \int_{\Delta x} (R'_1 R_1 + R'_2 R_2) dx'. \quad (6a)$$

Здесь r_g представляет собой радиус «большого шара», Δx — интервал, в котором лежат оба волновых числа ¹⁾ x и x' , соответствующих R_1 , R_2 и R'_1 , R'_2 . Заметим, что по образцу (II.8.10a) следовало бы, собственно говоря, вместо R'_1 и R'_2 писать в (6a) R_1^* и R_2^* . Однако, поскольку радиальные собственные функции, как мы только что видели, «в существенной части вещественны», этим обстоятельством можно пренебречь. Постоянные фазовые множители войдут тогда в N_r . Правда, нормирующий множитель становится комплексным, но это не только не представляет никаких неудобств, но, наоборот, даже несколько упрощает дальнейшие выкладки.

Нам предстоит теперь найти аналог тождества Грина (II.8.6), которое в своё время позволило нам провести интегрирование по r , пользуясь только асимптотическими свойствами радиальных собственных функций. Для этой цели рассмотрим дифференциальные уравнения (7.33) для функций R_1 и R_2 , соответствующих собственному значению E , а также выпишем аналогичные уравнения для R'_1 и R'_2 (при собственном значении E'). Умножим эти четыре уравнения последовательно на

$$R'_2, -R'_1, -R_2, R_1$$

и сложим их почленно. При этом величины V , E_0 и k , будучи во всех четырёх уравнениях одинаковыми, выпадут, и мы получим в правой части равенства:

$$\frac{1}{\hbar c} (E - E') (R'_1 R_1 + R'_2 R_2).$$

В левой же части будет стоять выражение

$$R'_2 \frac{dR_1}{dr} - R'_1 \frac{dR_2}{dr} - R_2 \frac{dR'_1}{dr} + R_1 \frac{dR'_2}{dr} + \frac{2}{r} (R_1 R'_2 - R'_1 R_2),$$

которое при умножении на r^2 превращается в полную производную

$$\frac{d}{dr} r^2 (R_1 R'_2 - R'_1 R_2).$$

¹⁾ В гл. II волновые числа обозначались посредством k_1 и k_2 ; здесь же нижние индексы следует сохранить для различения радиальных функций R_1 и R_2 .

Таким образом, мы получаем искомый аналог формулы Грина:

$$\int (R'_1 R_1 + R'_2 R_2) r^2 dr = \frac{\hbar c}{E' - E} r^2 (R'_1 R_2 - R_1 R'_2). \quad (7)$$

Подставим сюда указанные в (6а) пределы интегрирования (0 и r_g). Тогда правую часть можно вычислить, пользуясь асимптотическим представлением (15) дополнения 16. Мы получаем:

$$R_1 R'_2 - R'_1 R_2 = \frac{4B_1 B_2}{|\rho| |\rho'|} \left\{ -|s'| \cos \frac{|\rho|}{2} + \dots \right\} \sin \left(\frac{|\rho'|}{2} + \dots \right) + \\ + |s| \cos \left(\frac{|\rho'|}{2} + \dots \right) \sin \left(\frac{|\rho|}{2} + \dots \right) \}. \quad (7)$$

Аргументы ρ и ρ' в правой части равенства относятся соответственно к волновым числам x и x' ; многоточиями обозначены члены вида $|n| \ln |\rho| - \delta$ (см. дополнение 16). После тригонометрических преобразований это принимает вид:

$$R_1 R'_2 - R'_1 R_2 = \frac{2B_1 B_2}{|\rho| |\rho'|} \left\{ (|s| - |s'|) \sin \left(\frac{|\rho| + |\rho'|}{2} + \dots \right) + \right. \\ \left. + (|s| + |s'|) \sin \left(\frac{|\rho| - |\rho'|}{2} + \dots \right) \right\}. \quad (7a)$$

При $x' \rightarrow x$ первый член в фигурных скобках становится сколь угодно малым по сравнению со вторым.

Далее, имея в виду тот же предельный переход, можно положить:

$$B_1 = B_2 = B, \quad |s'| + |s| = 2|s|,$$

а перед скобкой в соответствии с (1а) можно написать:

$$|\rho| = |\rho'| = 2xr.$$

Однако в аргументе синуса (во втором слагаемом в фигурной скобке) надо писать аккуратнее:

$$\frac{|\rho| - |\rho'|}{2} = (x - x')r.$$

При этом члены, обозначенные в (7а) многоточиями, оказываются для дальнейшего несущественными. После всех этих упрощений правая часть (7а) принимает вид (при $r = r_g$):

$$\frac{B^2 |s| \hbar c}{x^2} \cdot \frac{1}{E' - E} \sin \{(x' - x)r_g\}. \quad (8)$$

Воспользуемся теперь, как и на стр. 110, известным равенством

$$\int_{-a}^b F(x) \sin r_g x \frac{dx}{x} = \pi F(0) \quad \text{при } r_g \rightarrow \infty.$$

В применении к (8) положим:

$$F(x) = \frac{x' - x}{E' - E}, \quad F(0) = \left(\frac{dx}{dE} \right)_{x'=x}, \quad a = x - x'_{\text{макс}}, \quad b = x_{\text{макс}} - x'.$$

На основании (1а) имеем:

$$\frac{dx}{dE} = \frac{1}{\hbar c} \frac{E}{\sqrt{E^2 - E_0^2}} = \frac{E}{\hbar^2 c^2 x}.$$

Таким образом, формулы (6а), (7), (7а) и (8) дают нам:

$$X = \frac{\pi B^2 |\varepsilon| E}{\hbar c \kappa^3}, \quad (9)$$

или, если подставить значение B [см. дополнение 16, формулу (16)]:

$$X = - \frac{\pi |\varepsilon| E}{\hbar c \kappa^3} \left| \frac{\Gamma(2V+1)}{\Gamma(V+1+i|n|)} \right|^2 e^{-\pi |n|} \cdot e^{2i\alpha + i\pi V}. \quad (9a)$$

Нормирующий множитель N_r^2 , как и в (9.14), даётся обратным выражением:

$$N_r^2 = - \frac{1}{\pi} \frac{\hbar c \kappa^3}{|\varepsilon| E} \left| \frac{\Gamma(V+1+i|n|)}{\Gamma(2V+1)} \right|^2 e^{\pi |n|} e^{-2i\alpha - i\pi V}. \quad (10)$$

Из сопоставления (10) и (5б) сразу явствует, что обе нормированные радиальные собственные функции $N_r R_1$ и $N_r R_2$ являются вещественными, так как мнимые фазовые множители в них сокращаются. Мы ещё воспользуемся этим обстоятельством в дальнейшем, например, в дополнении 8.

Всё изложенное справедливо не только для верхней, но и для нижней зоны непрерывного спектра, т. е. для состояний с отрицательной энергией (в последнем случае надо только изменить знак у мнимого главного квантового числа n).

Теперь возникает вопрос о возможности спонтанных переходов электрона из основного (или какого-нибудь возбуждённого) состояния водородного атома в состояния с отрицательной энергией. Если вероятность такого перехода окажется конечной, то водородный атом будет неустойчивым, и, в частности, его основное состояние не будет заслуживать своего названия.

Соответствующие вычисления производятся (с использованием полученных ранее выражений для собственных функций) по формулам § 9, где мы уже нашли интегралы по углам от компонент вектора тока. Следует только иметь в виду, что в данном случае необходимо учитывать фактор запаздывания. В результате полная вероятность перехода (которая получается интегрированием по всем состояниям отрицательной энергии) оказывается столь большой¹⁾, что время жизни основного состояния должно было бы составлять всего около 10^{-2} сек. Иначе говоря, атом водорода оказывается совершенно неустойчивым. Прежде чем мы познакомимся с радикальным средством, предложенным Дираком для устранения этой нестабильности, надо обратить внимание на следующее обстоятельство.

Переход в состояния с отрицательной энергией возможен только в поле ядра водородного атома: если устремить заряд ядра к нулю (т. е. перейти к случаю свободного электрона), то и вероятность перехода обращается в нуль. Это утверждение справедливо не только для переходов с положительных уровней на отрицательные, но также и для переходов между состояниями с положительной энергией в соответствии с тем очевидным фактом, что пучок катодных лучей сам по себе никоим образом не переходит в состояние с меньшей энергией, испуская разность энергии в виде излучения. (Последнее означало бы спонтанное испускание рентгеновских лучей электронным пучком, беспрепятственно, т. е. без всякого торможения, движущимся в вакууме!) Однако поучительно вывести этот результат из наших формул. Этим мы сейчас и займёмся (нижний уровень может соответствовать как положительной, так и отрицательной энергии).

¹⁾ J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. 35, 939 (1930).

Пусть свободный электрон в более высоком состоянии (с волновым числом k и энергией E) описывается волновой функцией u , а в более низком (с волновым числом k' и энергией E') — сопряжённой волновой функцией v ; как u , так и v можно взять из (5.45). С другой стороны, мы можем выделить временной множитель, полагая подобно (5.33) и (5.34):

$$\left. \begin{aligned} u &= \psi e^{ik_4 \omega_4}, & \psi &= (\psi_1 + \gamma_1 \psi_2 + \gamma_3 \psi_3 + \gamma_{31} \psi_4) \Gamma, \\ v &= \bar{\chi} e^{-ik'_4 \omega_4}, & \bar{\chi} &= \Gamma (\chi_1^* - \gamma_1 \chi_2^* - \gamma_3 \chi_3^* + \gamma_{31} \chi_4^*). \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

[Мы пользуемся здесь тем же делителем нуля $\Gamma = \frac{1}{4}(1 + i\gamma_{12})(1 + \gamma_4)$, который фигурирует и в (5.45).] Выполняя приведение в (11) и сравнивая результат с (5.45), мы получаем, опуская все общие множители:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4 &= i(k_4 + ik_0, k_1 - ik_2, k_2, 0) e^{i(k, r)}, \\ \chi_1^*, \chi_2^*, \chi_3^*, \chi_4^* &= i(k'_4 + ik'_0, -k'_1 + ik'_2, -k'_3, 0) e^{-i(k', r)}. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Вычислим, например, излучение, обусловленное $(j_1 + ij_2)$ -компонентой тока. Для этого надо воспользоваться формулой (9.8), вводя в неё дополнительно существенный в данном случае фактор запаздывания

$$e^{-i(z, r)}, \quad z = \frac{2\pi}{\lambda} n \quad (13)$$

(здесь n — единичный вектор в направлении распространения волны, λ — длина волны излучаемого света). Мы получаем:

$$U = \int (j_1 + ij_2) d\tau = C \int e^{i(k-k'-z, r)} d\tau, \quad (14)$$

где

$$C = 2icN_1 N_2 (k'_1 - ik'_2)(k_4 + ik_0). \quad (14a)$$

Однако интеграл (14) очевидным образом расходится. Чтобы сделать его сходящимся, надо (как и при нормировке волновых функций) «размазать» хотя бы одно из волновых чисел k, k' , т. е. проинтегрировать по некоторому конечному интервалу значений волнового числа.

Мы, однако, предпочтём вместо этого заменить одно из волновых чисел (скажем, k) волновым пакетом удобного (например, гауссовского) вида. Таким образом, заменяя в (14) k на K , мы вводим ещё дополнительный интеграл по «пространству волновых чисел»

$$\int dK e^{-g(K-k)^2}. \quad (15)$$

Полагая g достаточно большим, можно добиться того, чтобы центр тяжести пакета лежал сколь угодно близко к точке $K = k$. (Это мы и сделаем после выполнения интегрирования.) Очевидно, величина $(K - k)^2$ представляет собой квадрат расстояния между точками K и k в пространстве волновых чисел K . Таким образом, мы пользуемся волновым пакетом не «прямоугольной» формы (единица в интервале Δk и нуль вне его), как при нормировке, а выбираем его в виде гауссовой кривой ошибок. Этот метод окажется полезным нам и в дальнейшем (при рассмотрении эффекта Комптона).

Итак, мы получаем вместо (14) сходящийся интеграл

$$U = C \lim_{g \rightarrow \infty} \int d\tau \int dK e^{-g(K-k)^2} e^{i(K-k'-z, r)} \quad (15a)$$

Выражение (15а) представляет собой шестикратный интеграл типа Фурье. Вычисляя его с помощью теоремы Фурье [см., например, (III.7.3)], находим:

$$U = (2\pi)^3 C \lim_{q \rightarrow \infty} e^{-q(\mathbf{k}' + \mathbf{x} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (16)$$

т. е. $U = 0$, если только не выполняется соотношение

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{x}. \quad (17)$$

Будучи умножено на \hbar , равенство (17) представляет собой, очевидно, не что иное, как закон сохранения импульса.

Однако хорошо известно, что в данном случае (один свободный электрон в начальном состоянии, свободный электрон и фотон — в конечном) закон сохранения импульса несовместим с законом сохранения энергии. В этом можно убедиться, например, следующим образом. Согласно (17), волновые векторы \mathbf{k} , \mathbf{k}' и \mathbf{x} образуют треугольник. Следовательно, их абсолютные величины должны удовлетворять теоремам о сумме и разности сторон треугольника, а именно:

$$k + k' \geq x, \quad k - k' \leq x.$$

Возводя эти соотношения в квадрат, получаем неравенства:

$$k^2 + k'^2 - x^2 + 2kk' \geq 0,$$

$$k^2 + k'^2 - x^2 - 2kk' \leq 0,$$

почленное перемножение которых даёт:

$$(k^2 + k'^2 - x^2)^2 - 4k^2 k'^2 \leq 0. \quad (18)$$

Из выражений для энергии электрона в начальном и конечном состояниях находим:

$$\hbar^2 c^2 k^2 = E^2 - E_0^2, \quad \hbar^2 c^2 k'^2 = E'^2 - E_0^2, \quad (19)$$

для фотона закон сохранения энергии даёт:

$$E - E' = \hbar\nu = \hbar c x,$$

или после возведения в квадрат

$$\hbar^2 c^2 x^2 = (E - E')^2. \quad (20)$$

Подставим теперь (19) и (20) в (18). После соответствующих преобразований находим окончательно:

$$E_0^2 (E - E')^2 \leq 0,$$

что, очевидно, невозможно. Полученное противоречие означает, что равенство (17) не может выполняться и, следовательно, $U = 0$.

Возможность такого спонтанного перехода в атоме водорода обусловлена тем, что в этом случае в процессе участвует ещё атомное ядро, которому связанный электрон может передать избыток своего импульса. При этом в силу закона сохранения импульса ядро испытывает отдачу. Рассматриваемое явление можно сравнить с ускорением химических реакций при гетерогенном катализе, которое тоже основано на изменении полного импульса системы благодаря наличию внешних сил.

Нельзя ли просто исключить из рассмотрения столь роковые для связанного электрона уровни отрицательной энергии? Но ведь они образуют пол-

ную систему на равных правах с положительными уровнями и, следовательно, соответствующие им собственные функции не менее других необходимы для представления самого общего состояния. Например, при рассмотрении задачи о рассеянии света было показано¹⁾, что, для того чтобы получить из теории Дирака правильную формулу Релея, необходимо учитывать состояния с отрицательной энергией. Соответственно все попытки видоизменить уравнение Дирака так, чтобы исключить отрицательные уровни, обречены на неудачу.

Следовательно, вопрос может стоять только о том, чтобы сделать эти уровни «безвредными». Путь к решению был указан Дираком, предположившим, что все уровни отрицательной энергии уже заняты электронами. Тогда по принципу Паули переход в эти состояния запрещён и устойчивость атома водорода обеспечена!

Однако, что если мы сумеем искусственным путём извлечь один из электронов из мира отрицательных уровней в состоянии с положительной энергией? Это может случиться, например, при фотоэффекте, если только частота возбуждающего света достаточно велика²⁾. Выше уже отмечалось, что энергия $h\nu$ наиболее жёстких γ -лучей превышает $2E_0$, и, следовательно, они способны совершить необходимую для перевода электрона в верхнее состояние работу. Тем более способны на это фотоны, содержащиеся в космических лучах. В результате рассматриваемого процесса в системе уровней положительной энергии появится новый электрон (так, как если бы он был «создан»). Но это — не единственный результат. Произойдёт и ещё кое-что, а именно: на одном из уровней с отрицательной энергией появится дырка. Спрашивается, как она будет вести себя и какие действия она будет производить? Мы утверждаем, что эта дырка подобна положительно заряженному электрону.

Общее доказательство этого утверждения состоит в следующем. Напишем в векторной форме уравнение Дирака (2.4) для стационарного случая:

$$u = \psi e^{-i \frac{E}{\hbar} t}. \quad (21)$$

Мы имеем:

$$\left\{ \left(\gamma_4 \text{grad} - \frac{ie}{\hbar c} A \right) - \gamma_4 \frac{E - eV_1}{\hbar c} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \psi = 0. \quad (I)$$

Здесь V_1 означает потенциальную энергию единичного заряда, т. е. представляет собой не что иное, как скалярный потенциал (обычно обозначаемый буквой ϕ). Мы предполагаем, что в (I) $E > E_0$ (верхняя энергетическая зона) и $e < 0$ (обычный отрицательно заряженный электрон).

¹⁾ J. Waller, Zs. f. Phys. 61, 837 (1930).

²⁾ Следует добавить ещё: «и если на электрон действует достаточно сильное поле со стороны атомного ядра». Роль последнего, как и при обычном фотоэффекте (см. гл. VII), состоит в обеспечении сохранения импульса. В самом деле, постулируемый здесь процесс можно рассматривать как обратный спонтанному переходу электрона из состояния с положительной энергией (безразлично, связанного или нет) на отрицательный уровень, причём испускаемая энергия соответствует энергии кванта, поглощаемого при фотоэффекте. Как при любом спонтанном переходе, так, следовательно, и при обратном ему фотоэффекте наличие внешнего поля необходимо для того, чтобы выполнялся закон сохранения импульса. Мы убедимся в этом без всяких вычислений, рассматривая частный случай, когда энергия фотона $h\nu$ лишь незначительно превышает $2E_0$ (т. е. как раз достаточно для создания энергии покоя пары «электрон + позитрон»). Тогда для кинетической энергии частиц не остаётся практически ничего,

и, следовательно, они не могут воспринять импульс фотона, равный $\frac{h\nu}{c} \sim 2m_0c$. Действительно, для этого, по крайней мере, одна из частиц должна была бы двигаться со скоростью, близкой к c .

Изменим теперь знак у e , т. е. будем рассматривать вместо обычного отрицательно заряженного электрона гипотетический «позитрон». Волновую функцию последнего обозначим посредством ψ_+ . Из уравнения (I) мы получаем тогда:

$$\left\{ \left(\gamma, \text{grad} + \frac{ie}{\hbar c} A \right) - \gamma_4 \frac{E + eV_1}{\hbar c} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \psi_+ = 0. \quad (\text{II})$$

С другой стороны, рассмотрим обычный электрон в состоянии с отрицательной энергией; волновую функцию его обозначим через ψ' . Изменяя в (I) знак у E , находим:

$$\left\{ \left(\gamma, \text{grad} - \frac{ie}{\hbar c} A \right) + \gamma_4 \frac{E + eV_1}{\hbar c} + \frac{E_0}{\hbar c} \right\} \psi' = 0. \quad (\text{III})$$

Это уравнение по существу совпадает с (II). Слова «по существу» должны означать, что (II) и (III) отличаются друг от друга лишь знаками при γ_4 и i . Поскольку, однако, величины $\gamma = (\gamma, \gamma_4)$ и $\gamma' = (\gamma, -\gamma_4)$, равно как i и $i' = -i$, удовлетворяют одним и тем же правилам умножения, из любого решения ψ_+ уравнения (II) можно получить решение ψ' уравнения (III). Для этого надо только произвести в ψ_+ «несущественную» замену (γ, i) на (γ', i') .

То же самое, что и для собственных функций, справедливо и для четырёхмерного вектора тока, который, собственно, нас больше всего и интересует. По определению его мы имеем для позитрона:

$$\Gamma j_+ = ic \bar{\psi}_+ \gamma \psi_+, \quad \Gamma p_+ = \bar{\psi}_+ \gamma_4 \psi_+. \quad (\text{IV})$$

Заменяя здесь (γ, i) на (γ', i') , находим:

$$\Gamma j' = -ic \bar{\psi}' \gamma \psi', \quad \Gamma p' = -\bar{\psi}' \gamma_4 \psi'. \quad (\text{V})$$

Если отвлечься здесь от общего множителя -1 , то (V) представляет собой не что иное, как четырёхмерный вектор тока в состоянии ψ' (т. е. вектор, относящийся к электрону в состоянии с отрицательной энергией). Но общий множитель (-1) можно включить в делитель нуля, который пока ещё всё равно не определён. Таким образом, из (IV) и (V) следует:

$$j' = j_+, \quad p' = p_+. \quad (\text{VI})$$

Позитрон с положительной энергией E ведёт себя во внешнем поле V_1 , А так же, как электрон в состоянии с отрицательной энергией $-E$.

При этом мы допускаем¹⁾ (и должны допустить), что когда все уровни с отрицательной энергией заняты обычными электронами, последние никак не влияют на процессы, происходящие в мире положительной энергии.

Чтобы сформулировать это предположение математически, изменим формально определение плотности (и соответственно тока), положив

$$\Gamma p = \sum_{\substack{\text{(по всем занятым} \\ \text{уровням } E \geq 0)}} \bar{\psi} \gamma_4 \psi - \sum_{\substack{\text{(по всем} \\ \text{уровням } E < 0)}} \bar{\psi} \gamma_4 \psi \quad (\text{VII})$$

(так называемый «вычитательный формализм»).

¹⁾ С этим предложением связана та трудность, что даже в вакууме, когда все уровни положительной энергии свободны, имеется бесконечно большой заряд, обусловленный электронами в состояниях с отрицательной энергией. Чтобы исключить влияние этого заряда (например, на распространение света в пустоте), приходится вводить новые правила вычислений с ним. См., в частности, работы P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. 30, 150 (1934) и W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 90, 209 (1934). Наше новое определение плотности (VII) составляет только первый шаг в этом направлении.

В первой сумме суммирование производится по всем занятым состояниям, соответствующим как положительной, так и отрицательной энергии; во второй сумме — по всем состояниям отрицательной энергии — как занятым, так и не занятым. Первая сумма, взятая сама по себе, являлась бы в соответствии с формулами теории Шредингера или Дирака естественным выражением для плотности рассматриваемой здесь совокупности электронов. Однако она расходится и потому мы вычитаем из неё вторую (также расходящуюся) сумму. Последняя является постоянной (т. е. не зависит от чисел заполнения) и сдвигает нуль плотности в конечную область. Для доказательства формулы (VII) рассмотрим частные случаи.

а) Вакуум — все уровни с отрицательной энергией заняты, все уровни с положительной энергией свободны. При этом первая и вторая суммы в (VII) взаимно уничтожаются, и мы получаем $\rho = 0$.

б) Один обычный электрон в состоянии с положительной энергией. Поскольку все уровни отрицательной энергии заняты, соответствующие члены в (VII) взаимно уничтожаются, и остаётся, как это и должно быть, только плотность в одном (занятом) состоянии с положительной энергией.

в) Одна дираковская дырка — все уровни положительной энергии свободны, все уровни отрицательной энергии, кроме одного, заняты. В (VII) остаётся (и притом с отрицательным знаком — электрона нет!) только плотность, соответствующая этому незанятому уровню. Умножая плотность числа частиц ρ на заряд электрона $-|e|$, мы переходим к плотности заряда, которая оказывается равной $|e| \cdot |\rho|$, что формально совпадает с плотностью заряда позитрона.

Отсюда вытекает сделанное нами ранее утверждение: дираковская дырка ведёт себя как позитрон. Она будет отталкиваться от протона, при движении в магнитном поле будет отклоняться в сторону, противоположную отклонению электрона.

Мы закончим этот параграф рассмотрением документа, которым мы обязаны исследованиям супругов И. Кюри и Ф. Жолио-Кюри. Речь идёт о вильсоновской фотографии рождения пары «электрон-позитрон» под действием γ -лучей от ThC'' , иначе говоря, о настоящем фотографически зафиксированном процессе «материализации» энергии излучения. Обе частицы внезапно, в одной и той же точке и в один и тот же момент времени возникают «из ничего» (из дираковского фона). Электрон, выбитый γ -лучами из своего начального состояния с отрицательной энергией, движется налево, позитрон, свидетельствующий о наличии дырки в фоне отрицательных уровней, — направо. Искривление траектории электрона свидетельствует о наличии магнитного поля; тот факт, что траектория позитрона искривилась в противоположном направлении, означает, что магнитное поле отклоняет дираковскую дырку



Рис 17. Снимок Кюри-Жолио. Образование пар γ -лучами ThC'' .

в сторону, противоположную отклонению обычного электрона, т. е. она действует на дырку как на частицу с массой электрона и противоположным ему по знаку зарядом.

Исследуя снимок, можно установить, в частности, что скорости обоих партнёров различны: позитрон получил больше энергии (его траектория менее искривлена). Вся кинетическая энергия, переданная обоим частицам, составляет (см. стр. 259):

$$h\nu_{\text{ThC}} - 2m_0c^2 = 2,6 \cdot 10^6 - 1,0 \cdot 10^6 = 1,6 \cdot 10^6 \text{ эв},$$

что довольно точно совпадает с суммой энергий электрона и позитрона, вычисленной по кривизне их траектории. Точно определённой является лишь эта суммарная энергия; как именно она распределится между обоими партнёрами, заранее точно сказать нельзя. Заметим только, что при «малой» полной энергии наиболее вероятно равномерное её распределение¹⁾; если же полная энергия «велика», то чаще всего один из партнёров оказывается в предпочтительном положении. От природы ядра, которое неизбежно должно присутствовать при образовании пары (см. примечание на стр. 267), распределение энергии между партнёрами, повидимому, заметным образом не зависит [исследовалось образование пар в воздухе, свинце, алюминии и т. д.²⁾].

При истолковании рассмотренного фотоснимка массы электрона и позитрона предполагались одинаковыми. Это предположение было с замечательной точностью проверено и подтверждено прямыми опытами в прекрасной работе³⁾ (по отклонению частиц в поле измерялось отношение $\frac{e}{m}$). Очевидно, в дираковской теории дырок это равенство масс необходимо должно предполагаться.

§ 11. ПАРАДОКС КЛЕЙНА

О. Клейном⁴⁾ было показано, что при определённых условиях наличие состояний отрицательной энергии может заметно сказаться на поведении электронов с положительной энергией, приводя к весьма парадоксальным следствиям. При этом рассмотренный в предыдущем параграфе фотопереход электрона из нижней в верхнюю энергетическую зону отнюдь не является необходимым.

Речь идёт о прохождении электрона через потенциальный барьер. В рамках теории Шредингера эта задача была рассмотрена в гл. I, § 4. Как и там, мы будем сначала считать барьер бесконечно крутым. Пусть он начинается в точке $x=0$ (мы ограничимся одномерной задачей). Зависимость волновой функции от времени пусть определяется множителем

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et},$$

причём E положительно и $E > E_0$.

¹⁾ Н. Bethe u. W. Heitler, Proc. Roy. Soc. A146, 83 (1934).

²⁾ См. замечания Жолио на 7-м Сольвеевском конгрессе (Rapports du 7^me Congrès Solvay, Paris, 1934, стр. 149), а также работу G. Herzog u. P. Scherrer, Journ. de Phys. 6, 489 (1935), в которой описаны наблюдения на вершине Юнгфрау, подтвердившие теоретические выводы Бете и Гайтлера. Далее в работе Н. Кларманн u. W. Bothe, Zs. f. Phys. 101, 489 (1936) описаны наблюдения образования пар в камере Вильсона, наполненной ксеноном и криптоном.

³⁾ J. Thibaud, Journ. d. Phys. 5 (1934).

⁴⁾ O. Klein, Zs. f. Phys. 53, 157 (1929).

Положим в уравнении Дирака (2.4):

$$\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 0, \quad \Phi_4 = i\varphi, \quad -\frac{i\epsilon}{\hbar c} \Phi_4 = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ \frac{V}{\hbar c}, & x > 0. \end{cases}$$

Тогда мы получим:

$$x < 0, \quad \gamma_1 \frac{d\psi}{dx} - \frac{\gamma_4 E - E_0}{\hbar c} \psi = 0, \quad (I)$$

$$x > 0, \quad \gamma_1 \frac{d\psi}{dx} - \frac{\gamma_4 (E - V) - E_0}{\hbar c} \psi = 0. \quad (II)$$

Как видно из (I) и (II), оба эти уравнения действуют только в группе кватернионов (1, γ_1 , γ_4 , γ_{14}).

Будем искать решение (I) в виде:

$$\psi = A e^{ikx}. \quad (1)$$

Тогда A должно удовлетворять уравнению

$$\left(ik\gamma_1 - \frac{\gamma_4 E - E_0}{\hbar c} \right) A = 0. \quad (2)$$

Отсюда подобно (4.5) и (4.9) находим:

$$k^2 = \frac{E^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2}, \quad (3)$$

$$A = \left(ik\gamma_1 - \frac{\gamma_4 E + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma. \quad (4)$$

Равенство (3) представляет собой выражение для энергии для области (I) оно полностью идентично (4.7):

$$c^2 p^2 = E^2 - E_0^2. \quad (3a)$$

Частное решение (I) описывает «падающую волну». Помимо него, равным образом возможно и другое частное решение:

$$\psi = A' e^{-ikx}, \quad (5)$$

изображающее волну, «отражённую» в точке $x = 0$. Величина A' должна удовлетворять уравнению, получающемуся из (2) изменением знака у k . Отсюда следует аналогично (4):

$$A' = B \left(-ik\gamma_1 - \frac{\gamma_4 E + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma. \quad (6)$$

Мы ввели ещё постоянный (и не содержащий γ) множитель B [в (4) соответствующая величина была по условию нормирована к единице]. Равенство (3), естественно, при изменении знака k остаётся в силе. Общее решение уравнения (I) представляет собой линейную комбинацию (1) и (5):

$$\psi = A e^{ikx} + A' e^{-ikx}. \quad (7)$$

В области (II) ищем решение в виде:

$$\psi = A'' e^{ik'x}; \quad (8)$$

тогда для A'' получается уравнение, аналогичное (2):

$$\left(ik'\gamma_1 - \frac{\gamma_4 (E - V) - E_0}{\hbar c} \right) A'' = 0. \quad (9)$$

В противоположность (7) в области (II) следует ограничиться частным решением (8), так как по условию волн, движущихся из $+\infty$, не имеется. Как и раньше, в случае (3) и (4), из (9) следует:

$$k'^2 = \frac{(E-V)^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2}, \quad (10)$$

$$A'' = C \left(ik' \gamma_1 - \frac{\gamma_4 (E-V) + E_0}{\hbar c} \right) \Gamma, \quad (11)$$

где C — постоянный множитель, не содержащий величин γ [см. замечание после формулы (6)].

Теперь надлежит удовлетворить граничным условиям, согласно которым решения (7) и (8) должны непрерывно переходить друг в друга в точке $x=0$. Поскольку, в отличие от уравнения Шредингера, уравнение Дирака — первого порядка, мы получаем (методом, описанным в гл. I, § 4) лишь одно условие:

$$\psi_I = \psi_{II} \quad \text{при } x=0, \quad (12)$$

т. е.

$$A + A' = A''. \quad (13)$$

Однако благодаря наличию величин γ это условие расщепляется на два. Действительно, надо принять во внимание фигурирующий справа в (4), (6) и (11) множитель Γ . В качестве такового можно взять делитель нуля, имеющийся в нашей группе кватернионов, положив, например¹⁾, $\Gamma = \frac{1}{2}(1 + \gamma_4)$. Тогда во всех выражениях для A , A' и A'' можно заменить γ_4 единицей. Таким образом, объединяя члены, содержащие, с одной стороны, $\gamma_4 \Gamma$, а с другой — Γ , можно переписать (13) в виде:

$$i[k(1-B) - k'C] \gamma_1 \Gamma - \frac{1}{\hbar c} [(E+E_0)(1+B) - (E-V+E_0)C] \Gamma = 0.$$

Поскольку коэффициенты при $\gamma_1 \Gamma$ и при Γ должны обращаться в нуль независимо, мы имеем:

$$\frac{k}{k'}(1-B) = C, \quad \frac{E+E_0}{E-V+E_0}(1+B) = C. \quad (14)$$

В предельном случае нерелятивистской теории $E_0 \rightarrow \infty$, и соотношения (14) превращаются точно в равенства (IVb) § 4 гл. I.

Таким образом, действительно одно граничное условие (12) эквивалентно двум условиям (IV) и (IVa) § 4 гл. I.

Исключая C и принимая во внимание (3) и (10), мы получаем из (14):

$$B = \left. \begin{aligned} \frac{k}{k'} - \frac{E+E_0}{E-V+E_0} &= \frac{a-b}{a+b}, & a^2 &= \frac{E-E_0}{E+E_0}, \\ \frac{k}{k'} + \frac{E+E_0}{E-V+E_0} &= \frac{a+b}{a+b}, & b^2 &= \frac{E-V-E_0}{E-V+E_0}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

В то же время из первого или второго равенства (14) следует:

$$C = \frac{k}{k'} \frac{2b}{a+b} = \frac{E+E_0}{E-V+E_0} \cdot \frac{2a}{a+b}. \quad (16)$$

¹⁾ Множитель $\frac{1}{2}$ «нормирует» Γ к единице, так что $\Gamma^2 = \Gamma$. Помимо $\frac{1}{2}(1 + \gamma_4)$ делителями нуля в рассматриваемой группе являются также выражения $\frac{1}{2}(1 + \gamma_1)$ или $\frac{1}{2}(1 + i\gamma_{14})$; в отличие от первого, однако, они не являются самосопряжёнными.

Рассмотрим следующие частные случаи:

$$\left. \begin{array}{l} 1) V=0, \quad b=a, \quad B=0, \\ 2) V=E-E_0, \quad b=0, \quad B=1, \\ 3) V=E+E_0, \quad b=\infty, \quad B=-1, \end{array} \right\} B^2=1.$$

$$4) V=\infty, \quad b=1, \quad B=\frac{a-1}{a+1}.$$

Возводя последнее выражение в квадрат и пользуясь (3а), получим формулу Клейна:

$$B^2 = \frac{E - cp}{E + cp}. \quad (17)$$

Назовём величину $R = |B|^2$ коэффициентом отражения (подробное обоснование такого наименования будет дано в дальнейшем). Тогда на основании (15) имеем:

$$R = \begin{cases} \left(\frac{a-b}{a+b}\right)^2 & \text{при } V < E - E_0 \text{ и } V > E + E_0, \\ 1 & \text{при } E - E_0 < V < E + E_0. \end{cases} \quad (18)$$

Мы видим, что в области между 1) и 2) коэффициент отражения ведёт себя в соответствии с тем, чего следовало ожидать, — в основном так, как было описано в § 4 гл. I (при $V \leq W$). При $V=0$ не получается, естественно, никакого отражения, при $V=E-E_0$ отражение является полным.

Между 2) и 3) лежит область полного отражения, причины появления которой были выяснены в гл. I с помощью оптической аналогии. Во всей этой области $b^2 < 0$, т. е. b — чисто мнимое число (в то время как a вещественно). Соответственно здесь, как уже указано в (18), $R=1$.

Напротив, в области между 3) и 4) электрон ведёт себя парадоксально. Здесь и a и b — вещественные величины и, следовательно, $R < 1$: отражение является не полным, а лишь частичным, несмотря на то, что энергии электрона E недостаточно для преодоления потенциального барьера $V > E + E_0$. Иначе говоря, имеется конечная вероятность того, что электрон проникает в область (II). Но это совершенно непонятно как с точки зрения классической механики, так и с точки зрения волновой механики Шредингера (в последней рассматриваемая область соответствует случаю $V \rightarrow \infty$). На рис. 18 представлено поведение коэффициента отражения R (абсцисса) при увеличении V (ордината).

Чтобы оправдать отождествление коэффициента отражения R с $|B|^2$, вычислим ток и плотность в падающей и отражённой волне (интерференция этих волн нас здесь не интересует; точнее, мы имеем в виду только значения тока и плотности, усреднённые по интервалу, большому по сравнению с длиной волны). Для этой цели необходимо знать прежде всего сопряжённую волновую функцию, которую мы обозначим символом φ . Сопоставим φ с исходной

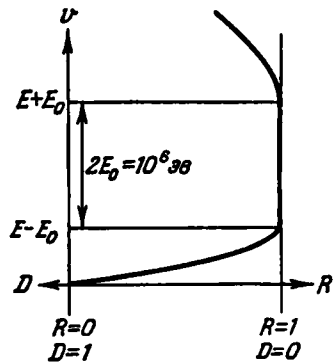


Рис. 18. Зависимость коэффициента отражения R и коэффициента прохождения D от высоты потенциального барьера V .

функцией ψ , имея в виду, что при использовании самосопряжённого делителя нуля $\Gamma = \frac{1}{2}(1 + \gamma_4)$ величину γ_4 в (4) и (6) можно заменить единицей.

Падающая волна:

$$\psi = qe^{ikx}\Gamma, \quad \varphi = \Gamma qe^{-ikx}. \quad (19)$$

(Величина $q = ik\gamma_1 - \frac{E + E_0}{\hbar c}$ является самосопряжённой.)

Отражённая волна:

$$\psi = Bq^*e^{-ikx}\Gamma, \quad \varphi = B^*\Gamma q^*e^{+ikx}. \quad (20)$$

Чтобы составить выражение для плотности¹⁾

$$\Gamma\rho = \varphi\gamma_4\psi, \quad (21)$$

заметим, что при перестановке множителей γ_4 и q (или q^*) последний превращается в q^* (соответственно в q). Поэтому

$$\Gamma \begin{Bmatrix} \rho_o \\ \rho_r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ B^*B \end{Bmatrix} \Gamma \begin{Bmatrix} qq^* \\ q^*q \end{Bmatrix} \Gamma.$$

Произведение qq^* не содержит величин γ . Действительно,

$$qq^* = q^*q = k^2 + \left(\frac{E + E_0}{\hbar c}\right)^2 = \frac{2E(E + E_0)}{(\hbar c)^2}.$$

Поэтому мы можем написать:

$$\begin{Bmatrix} \rho_o \\ \rho_r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ |B|^2 \end{Bmatrix} EG, \quad G = \frac{2(E + E_0)}{(\hbar c)^2}. \quad (22)$$

Далее, при вычислении тока

$$\Gamma j = ic\varphi\gamma_1\psi \quad (23)$$

появляются выражения

$$q\gamma_1q \text{ и соответственно } q^*\gamma_1q^*,$$

от которых при применении справа и слева делителя нуля Γ остаются только части, не содержащие γ . Последние имеют вид соответственно:

$$\mp 2ik \frac{E + E_0}{\hbar c} = \pm ik\hbar c G.$$

Принимая во внимание наличие множителей B^* , B в (20) и ic — в (23), получаем отсюда:

$$\begin{Bmatrix} j_o \\ j_r \end{Bmatrix} = k\hbar c^2 \begin{Bmatrix} 1 \\ -|B|^2 \end{Bmatrix} G. \quad (24)$$

Формулами (22) и (24) доказывается прежде всего наше утверждение: $R = |B|^2$. В самом деле, коэффициент отражения R можно определить либо как отношение плотностей $\rho_r : \rho_o$ (22), либо как (взятое с обратным знаком) отношение $j_r : j_o$ (24). Сверх того, из (22) и (24) вытекают соотношения:

$$j_o = v\rho_o; \quad j_r = -v\rho_r. \quad (25)$$

¹⁾ Вычисления, которые мы здесь производим, очевидно, представляют собой частный случай общего метода приведения, описанного в § 5 для полной группы, построенной на 16 гиперкомплексных единицах γ . Здесь мы применяем его к более простой группе кватернионов.

где v — корпускулярная скорость электрона, описываемого данной волной. Действительно, $k\hbar = mv$ представляет собой импульс, а $E = mc^2$ — энергию падающей и отражённой волн.

Аналогичным образом можно определить и коэффициент прохождения D , определив его как отношение $j_d : j_e$ (отношение $\rho_d : \rho_e$ здесь непосредственно нельзя использовать в силу различия скоростей v в двух рассматриваемых средах). При вещественном k' расчёт производится совершенно так же, как и раньше [формулы (23) — (24)], и потому может быть опущен. Мы получаем в конце концов:

$$D = \frac{j_d}{j_e} = \frac{k'}{k} \cdot \frac{E - V + E_0}{E + E_0} |C|^2. \quad (26)$$

Для вычисления правой части (26) заметим, что при вещественном k' величины b и C также вещественны [см. (15) и (16)]; сказанное относится к обеим областям: $V < E - E_0$ и $V > E + E_0$. Поэтому $|C|^2$ можно вычислить, просто перемножив два данных в (16) представления C . Подставляя результат в (26), находим:

$$D = \frac{4ab}{(a+b)^2} \text{ при } V < E - E_0 \text{ или } V > E + E_0. \quad (27)$$

В последнем случае электрон не обладает достаточной энергией для того, чтобы преодолеть потенциальный барьер, но коэффициент прохождения D тем не менее оказывается конечным. В этом и состоит *парадокс Клейна*.

Если, с другой стороны, k' является мнимой величиной (что имеет место в области полного отражения $E - E_0 < V < E + E_0$), то в соответствии с (8) и (11) роль q будет играть величина

$$q' = g\gamma_1 - f, \quad g = tk', \quad f = \frac{E - V + E_0}{\hbar c}, \quad (28)$$

где f и g вещественны. Для сопряжённого выражения мы получим:

$$\bar{q}' = -g\gamma_1 - f.$$

Следовательно, в произведении $\bar{q}'\gamma_1q'$ не будет ни одного члена, не содержащего величин γ_1 , и $\Phi\gamma_1\psi$ обратится в нуль.

Итак, в данном случае

$$j_d = 0, \quad D = 0. \quad (29)$$

Тем самым мы получили формальное обоснование утверждения, которое в § 4 гл. I [формула (VIIa)] было принято как физически самоочевидное: в случае полного отражения ток частиц во второй среде¹⁾ отсутствует и, следовательно, электроны не проходят через барьер. Далее, как непосредственно видно из сопоставления (18), (27) и (29), мы в общем виде вывели указанное в § 4 гл. I равенство (I. 4. VIII):

$$R + D = 1. \quad (30)$$

Соотношение (30) иллюстрируется также с помощью рис. 18, где одна и та же кривая может изображать как R (значения откладываются по оси абсцисс слева направо), так и D (значения откладываются справа налево). В пределе при $V \rightarrow \infty$ мы получаем из (17) и (30), пользуясь обозначениями Клейна:

$$D = \frac{2rp}{E + cp}. \quad (31)$$

¹⁾ Там имеется, однако, экспоненциально спадающая плотность.

В наших обозначениях на основании (27) мы имеем в этом случае ($b = 1$):

$$D = \frac{4a}{(a+1)^2}, \quad (31a)$$

что легко привести к виду (31).

Из рис. 19 должно быть видно, что парадокс Клейна является вполне понятным и необходимым следствием существования уровней отрицательной энергии. В левой части рисунка (где $x < 0$, $V = 0$) воспроизведена уже знакомая нам схема энергетических уровней свободного электрона (рис. 16). В правой же части приведена та же схема, но сдвинутая вверх на величину $V > E + E_0$. Благодаря этому смещению уровни, ранее соответствовавшие отрицательной энергии, поднимаются до области, которая в левой части рисунка занята состояниями с положительной энергией (и в которой заключается значение энергии E падающего на барьер электрона). Поскольку переход электрона во вторую среду происходит при постоянной энергии (что ясно видно уже из рис. 4), он приводит нас в данном случае в *нижнюю*

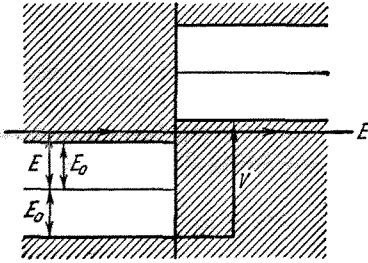


Рис. 19.

энергетическую зону, т. е. на один из уровней, *дозволенных* согласно теории Дирака. Тем самым объясняется проникновение электрона через потенциальный барьер высоты $V > E + E_0$. Иначе обстоит дело, когда правая часть рисунка сдвигается на меньшую величину — при $E - E_0 < V < E + E_0$. Тогда интересующая нас часть заштрихованной (дозволенной) энергетической зоны слева придёт против незаштрихованной области справа, и переход окажется запрещённым; будет иметь место полное отражение. Таким образом, из рассмотренного рисунка видно, что парадокс Клейна обусловлен смещением имеющихся в теории Дирака уровней отрицательной энергии.

Отсюда вытекает дальнейшее, едва ли не ещё более парадоксальное следствие: при $V > E + E_0$ импульс и скорость электрона направлены в противоположные стороны. Действительно, в несмещённой зоне отрицательных энергий

$$m = \frac{E}{c^2} < 0, \quad cp = \sqrt{E^2 - E_0^2} > 0$$

(если выбрать положительное значение квадратного корня), а групповая скорость

$$v = \frac{p}{m} = \frac{c}{E} \sqrt{E^2 - E_0^2} < 0.$$

Таким образом, пока уровни не сместились, v и p направлены в противоположные стороны. Но это же справедливо и для зоны, сдвинутой на величину V . В данном случае роль «энергии» E играет величина $E - V$, причём по условию $E - V < 0$ (мы предположили, что $V > E + E_0$, поэтому $E - V$ даже меньше, чем $-E_0$). Следовательно, и теперь

$$m = \frac{c^2}{E - V} < 0, \quad cp = \sqrt{(E - V)^2 - E_0^2} > 0,$$

$$v = \frac{p}{m} = \frac{c}{E - V} \sqrt{(E - V)^2 - E_0^2} < 0.$$

Как видно из всего сказанного, такое соотношение между скоростью и импульсом также является следствием существования уровней отрицательной энергии.

Вначале Клейн был склонен усматривать в обнаруженном им парадоксе серьёзную трудность теории Дирака. Практическим устранением этой трудности мы обязаны Заутеру. Последний заменил бесконечно крутой потенциальный барьер пологим и показал, что при этом в области $V > E + E_0$ коэффициент прохождения D оказывается много меньше единицы, если только изменение потенциала на отрезке порядка комптоновской длины волны мало по сравнению с E_0 . Тем самым для сглаженного потенциала парадокс Клейна практически устраняется.

Вначале Заутер¹⁾ рассмотрел случай линейно возрастающего потенциала (типа изображённого на рис. 3, стр. 28), но это привело к довольно сложным выкладкам. Более удобным оказался второй метод²⁾, при котором потенциал задаётся единым аналитическим выражением, изображённым на рис. 5, стр. 32.

Тогда во всей области изменения независимой переменной $-\infty < x < +\infty$ уравнение Дирака имеет вид:

$$\gamma_1 \frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{\hbar c} \left[\gamma_4 \left(E - \frac{V}{1 + e^{-ax}} \right) - E_0 \right] \psi = 0$$

[см. формулу (I. 4.3) для потенциала; в связи с используемыми теперь обозначениями мы заменили в ней U на V ; таким образом, теперь V есть высота потенциального барьера]. Производя замену переменного: $y = -e^{-ax}$ [см. (I. 4.5)], получаем:

$$\gamma_1 y (1-y) \frac{d\psi}{dy} + \frac{1}{\hbar ca} [(1-y)(\gamma_4 E - E_0) - \gamma_4 V] \psi = 0. \quad (32)$$

Для интегрирования этого уравнения следует прежде всего выполнить приведение с помощью одного из имеющихся в данной группе кватернионов делителей нуля

$$\Gamma = \frac{1}{2}(1 + \gamma_4), \quad \Gamma = \frac{1}{2}(1 + \gamma_1), \quad \Gamma = \frac{1}{2}(1 + i\gamma_{14}).$$

Имея в виду последующее исключение неизвестных функций в уравнении (34), удобно выбрать последнее из приведённых выражений, полагая

$$\psi = (\psi_0 + \gamma_1 \psi_1) \Gamma, \quad \Gamma = \frac{1}{2}(1 + i\gamma_{14}). \quad (33)$$

При подстановке (33) в (32) можно заменить γ_4 на $-i\gamma_1$, так как

$$\gamma_4 \Gamma = -i\gamma_1 \cdot i\gamma_{14} \Gamma, \quad i\gamma_{14} \Gamma = \Gamma.$$

Поэтому остаются только члены с $\gamma_1 \Gamma$ и Γ , каждый из которых должен обращаться в нуль. Таким образом, мы получаем систему дифференциальных уравнений для ψ_0 и ψ_1 :

$$\left. \begin{aligned} y(1-y) \frac{d\psi_0}{dy} - \frac{i}{\hbar ca} [(1-y)E - V] \psi_0 &= \frac{E_0}{\hbar ca} (1-y) \psi_1, \\ y(1-y) \frac{d\psi_1}{dy} + \frac{i}{\hbar ca} [(1-y)E - V] \psi_1 &= \frac{E_0}{\hbar ca} (1-y) \psi_0. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

¹⁾ F. Sauter, Zs. f. Phys. 69, 742 (1931). Эта работа замечательна ещё и тем, что в ней развита аналитический аппарат, использованный Гейзенбергом и Эйлером [W Heisenberg u. Euler, Zs. f. Phys. 98, 714 (1936)] для обобщения теории Максвелла на случай сильных полей.

²⁾ F. Sauter, Zs. f. Phys. 73, 547 (1931).

Определив ψ_1 из первого уравнения и подставив результат во второе, получим дифференциальное уравнение второго порядка для ψ_0 ; аналогично (пользуясь сначала вторым уравнением) можно исключить ψ_0 и получить дифференциальное уравнение второго порядка для функции ψ_1 .

Запишем уравнения для ψ_0 и ψ_1 единым образом:

$$y^2(1-y)\frac{d^2\psi_{0,1}}{dy^2} + y(1-y)\frac{d\psi_{0,1}}{dy} + \left\{ \frac{1-y}{(\hbar ca)^2} \left[\left(E - \frac{V}{1-y} \right)^2 - E_0^2 \right] \pm \frac{iV}{\hbar ca} \frac{y}{1-y} \right\} \psi_{0,1} = 0. \quad (35)$$

Двумя последовательными заменами переменных это можно привести к гипергеометрическому дифференциальному уравнению.

Первый шаг [см. (I. 4.6)]: $\psi_{0,1} = y^\mu \varphi_{0,1}$. Для $\varphi_{0,1}$ мы получаем:

$$y^2(1-y)\frac{d^2\varphi_{0,1}}{dy^2} + (2\mu+1)y(1-y)\frac{d\varphi_{0,1}}{dy} + \left\{ (1-y) \left(\mu^2 + \frac{1}{(\hbar ca)^2} \left[\left(E - \frac{V}{1-y} \right)^2 - E_0^2 \right] \right) \pm \frac{iV}{\hbar ca} \frac{y}{1-y} \right\} \varphi_{0,1} = 0. \quad (35a)$$

Мы хотим получить возможность разделить это уравнение на y . Для этого выражение в фигурной скобке должно обращаться в нуль при $y=0$. Отсюда

$$\mu^2 = -\frac{1}{(\hbar ca)^2} [(E-V)^2 - E_0^2] = -\frac{k^2}{a^2} \quad (36)$$

[см. (10) и (I. 4.13)].

Далее, обозначим для краткости:

$$v^2 = -\frac{1}{(\hbar ca)^2} [E^2 - E_0^2] = -\frac{k^2}{a^2} \quad (36a)$$

[см. (3) и (I. 4.15)].

Тогда вместо (35a) можно написать:

$$y(1-y)\frac{d^2\varphi_{0,1}}{dy^2} + (2\mu+1)(1-y)\frac{d\varphi_{0,1}}{dy} + \left\{ v^2 - \mu^2 + \frac{1}{1-y} \left(\frac{V^2}{(\hbar ca)^2} \pm \frac{iV}{\hbar ca} \right) \right\} \varphi_{0,1} = 0. \quad (37)$$

Второй шаг: $\varphi_{0,1} = (1-y)^{\pm\lambda} \chi_{0,1}$. Подставляя это в (37), находим:

$$y(1-y)\frac{d^2\chi_{0,1}}{dy^2} + [2\mu+1 - (2\mu \pm 2\lambda + 1)y] \frac{d\chi_{0,1}}{dy} + \left\{ v^2 - \mu^2 \mp \lambda(2\mu+1) + \frac{y}{1-y} (\lambda^2 \mp \lambda) + \frac{1}{1-y} \left(\frac{V^2}{(\hbar ca)^2} \pm \frac{iV}{\hbar ca} \right) \right\} \chi_{0,1} = 0. \quad (38)$$

Желая уничтожить члены, содержащие $1-y$ в знаменателе, преобразуем выражение в фигурной скобке следующим образом:

$$\{ \dots \} = v^2 - \mu^2 \mp \lambda(2\mu+1) - \lambda^2 \pm \lambda + \frac{1}{1-y} \left(\lambda^2 \mp \lambda + \frac{V^2}{(\hbar ca)^2} \pm \frac{iV}{\hbar ca} \right). \quad (38a)$$

Если положить

$$\lambda = i \frac{V}{\hbar ca}, \quad (38b)$$

то последнее слагаемое в (38a) обратится в нуль, и мы получим:

$$\{ \dots \} = v^2 - \mu^2 \mp 2\mu\lambda - \lambda^2 = -(\mu + v \pm \lambda)(\mu - v \pm \lambda). \quad (38b)$$

В результате уравнение (38) принимает вид:

$$y(1-y) \frac{d^2 \chi_{0,1}}{dy^2} + [2\mu + 1 - (2\mu \pm 2\lambda + 1)y] \frac{d \chi_{0,1}}{dy} - (\mu + \nu \pm \lambda)(\mu - \nu \pm \lambda) \chi_{0,1} = 0. \quad (39)$$

Это есть не что иное, как гипергеометрическое уравнение с параметрами:

$$a_{0,1} = \mu + \nu \pm \lambda, \quad b_{0,1} = \mu - \nu \pm \lambda, \quad c_{0,1} = 2\mu + 1. \quad (39a)$$

Таким образом, решение (38) дается формулой:

$$\chi_{0,1} = C_{0,1} F_{0,1}, \quad F_{0,1} = F(\mu + \nu \pm \lambda, \mu - \nu \pm \lambda, 2\mu + 1, y). \quad (39b)$$

Чтобы определить отношение констант $C_0 : C_1$, надо вернуться к уравнениям (34). Мы имеем:

$$\psi_0 = C_0 y^\mu (1-y)^\lambda F_0, \quad \psi_1 = C_1 y^\mu (1-y)^{-\lambda} F_1. \quad (40)$$

В частности, при $y=0$ с точностью до высших степеней y получаем ($F_0 = F_1 = 1$):

$$\begin{aligned} \psi_0 &= C_0 y^\mu, & \psi_1 &= C_1 y^\mu, \\ y \frac{d\psi_0}{dy} &= \mu C_0 y^\mu, & y \frac{d\psi_1}{dy} &= \mu C_1 y^\mu. \end{aligned}$$

Отсюда, в силу (34):

$$\begin{aligned} \left[\mu - \frac{i}{\hbar c a} (E - V) \right] C_0 &= \frac{E_0}{\hbar c a} C_1, \\ \left[\mu + \frac{i}{\hbar c a} (E - V) \right] C_1 &= \frac{E_0}{\hbar c a} C_0. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\left(\frac{C_0}{C_1} \right)^2 = \frac{\mu + \frac{i}{\hbar c a} (E - V)}{\mu - \frac{i}{\hbar c a} (E - V)}.$$

Пользуясь (36), (36a) и (38б), легко проверить, что

$$\frac{i}{\hbar c a} (E - V) = \frac{\nu^2 - \mu^2 - \lambda^2}{2\lambda}$$

и, следовательно,

$$\left(\frac{C_0}{C_1} \right)^2 = \frac{2\lambda\mu + \nu^2 - \mu^2 - \lambda^2}{2\lambda\mu - \nu^2 + \mu^2 + \lambda^2} = - \frac{(\mu + \nu - \lambda)(\mu - \nu - \lambda)}{(\mu + \nu + \lambda)(\mu - \nu + \lambda)}, \quad (40a)$$

или, в силу (39a):

$$\left(\frac{C_0}{C_1} \right)^2 = - \frac{a_1 b_1}{a_0 b_0}, \quad C_0 = \frac{C}{\sqrt{a_0 b_0}}, \quad C_1 = \frac{iC}{\sqrt{a_1 b_1}}. \quad (40b)$$

Итак, мы имеем на основании (33) и (40):

$$\psi = C y^\mu \left\{ \frac{(1-y)^\lambda}{\sqrt{a_0 b_0}} F_0 + i \gamma_1 \frac{(1-\lambda)^{-\lambda}}{\sqrt{a_1 b_1}} F_1 \right\} \Gamma. \quad (41)$$

Далее поступаем так же, как в § 4 гл. I, рассматривая два предельных случая:

- а) $x \rightarrow +\infty, \quad y \rightarrow 0.$
- б) $x \rightarrow -\infty, \quad y \rightarrow -\infty.$

а) Имея в виду, что $F(0) = 1$, $y = -e^{-a\omega}$, и принимая во внимание (36), мы получаем, выбирая подходящий знак у μ :

$$\psi = C(-1)^{\mu} e^{ik'\omega} \left(\frac{1}{\sqrt{a_0 b_0}} + \frac{i\gamma_1}{\sqrt{a_1 b_1}} \right) \Gamma. \quad (42)$$

б) Асимптотическое поведение функции F при $y \rightarrow -\infty$ определяется формулами (19), (24) и (24а) дополнения 16. Изменяя соответствующим образом обозначения, мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} F_0 &= D_0 (-y)^{-a_0} + E_0 (-y)^{-b_0}, & F_1 &= D_1 (-y)^{-a_1} + E_1 (-y)^{-b_1}, \\ D_{0,1} &= \frac{\Gamma(b_{0,1} - a_{0,1}) \Gamma(c_{0,1})}{\Gamma(b_{0,1}) \Gamma(c_{0,1} - a_{0,1})}, & E_{0,1} &= \frac{\Gamma(a_{0,1} - b_{0,1}) \Gamma(c_{0,1})}{\Gamma(a_{0,1}) \Gamma(c_{0,1} - b_{0,1})}. \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

Заменим, далее, в (41) $(1-y)^{\pm\lambda}$ на $(-y)^{\pm\lambda}$ и перейдём от y к x . Принимая во внимание (36а) и (39а), получаем:

$$\psi = C(-1)^{\mu} \left[\frac{D_0}{\sqrt{a_0 b_0}} + \frac{i\gamma_1 D_1}{\sqrt{a_1 b_1}} \right] e^{ik\omega} \Gamma + C(-1)^{\mu} \left[\frac{E_0}{\sqrt{a_0 b_0}} + \frac{i\gamma_1 E_1}{\sqrt{a_1 b_1}} \right] e^{-ik\omega} \Gamma. \quad (44)$$

Очевидно, первое слагаемое здесь изображает падающую, а второе — отражённую волну, в то время как волна, прошедшая через барьер, описывается формулой (42) (все три выражения относятся к асимптотическому поведению ψ -функции при $x = \pm\infty$).

Нас интересует, в основном, коэффициент прохождения (26):

$$D = \frac{j_d}{j_e},$$

вычисленный при условии $V > E + E_0$, когда обнаруживается парадоксальное поведение электрона. (При этом k' представляет собой вещественную величину.) Таким образом, надо вычислить асимптотическое (при $x \rightarrow \infty$) значение произведения

$$ic\varphi\gamma_1\psi, \quad (45)$$

пропорционального j_d . В соответствии с (42) сюда следует подставить

$$\psi = C(-1)^{\mu} c^{ik'\omega} q \Gamma, \quad \varphi = C^* (-1)^{\mu} e^{-ik'\omega} \bar{\Gamma} q, \quad (45a)$$

где

$$q = \frac{1}{\sqrt{a_0 b_0}} + \frac{i\gamma_1}{\sqrt{a_1 b_1}}. \quad (45b)$$

В формуле (45а) следует положить $\bar{\Gamma} = \frac{1}{2}(1 - i\gamma_1 \omega)$ (см. также примечание на стр. 272). Заметим, что имеют место соотношения:

$$\bar{\Gamma}\gamma_1\Gamma = \gamma_1\Gamma^{\dagger} = \gamma_1\Gamma, \quad \bar{\Gamma}\Gamma = 0.$$

Поэтому после приведения в выражениях для j_d и j_e останется множитель $\gamma_1\Gamma$ (а не просто Γ), что связано с несамоспряжённым характером используемого нами делителя нуля Γ . Опуская этот множитель в (45) [и соответственно далее в (47)], мы получим из (45) и (45а, б):

$$j_d = icC^*C \left(\frac{1}{a_0 b_0} - \frac{1}{a_1 b_1} \right). \quad (46)$$

Производя аналогичные вычисления для падающей волны [для чего следует исходить из первой строчки (44)], найдём:

$$j_e = icC^*C \left(\frac{|D_0|^2}{a_0 b_0} - \frac{|D_1|^2}{a_1 b_1} \right). \quad (47)$$

Таким образом,

$$D = \frac{a_1 b_1 - a_0 b_0}{|D_0|^2 a_1 b_1 - |D_1|^2 a_0 b_0}. \quad (48)$$

При этом, в силу (39а) и (43), мы имеем:

$$a_0 b_0 = (\mu + \lambda)^2 - \nu^2, \quad a_1 b_1 = (\mu - \lambda)^2 - \nu^2, \\ a_1 b_1 - a_0 b_0 = -4\mu\lambda, \quad (49)$$

$$|D_{0,1}|^2 = \left| \frac{\Gamma(-2\nu) \Gamma(2\mu + 1)}{\Gamma(\mu + \nu \pm \lambda) \Gamma(\mu - \nu \mp \lambda + 1)} \right|^2. \quad (50)$$

Иследуем это выражение для не слишком крутого барьера [для бесконечно крутого барьера из (50), как и должно быть, получается наша прежняя формула (27)]. «Крутым» мы называем барьер, ширина которого b (равная $\frac{4}{a}$; см., например, рис. 5, стр. 32) *мала* по сравнению с де-Бройлевской длиной волны падающего электрона (пропорциональной $\frac{1}{k}$). Таким образом, мы будем считать, что

$$\frac{k}{a} \ll 1, \quad \text{т. е., в силу (36а), } |\nu| \ll 1. \quad (50а)$$

Под «не слишком крутым» барьером мы понимаем такой (ср. стр. 277), ширина которого больше комптоновской длины волны:

$$b > \lambda_0, \quad \text{т. е. } \frac{ah}{m_0 c} < 4.$$

Отсюда, умножая на c , получаем:

$$\frac{E_0}{ahc} > \frac{1}{4} \quad \text{и, следовательно, } \frac{E_0}{ahc} > \frac{1}{4}.$$

Поскольку $V > E + E_0$, а $\lambda = i \frac{V}{hca}$ [см. (38б)], из написанного неравенства следует, что тем более

$$\frac{V}{ahc} = |\lambda| > \frac{1}{4}. \quad (50б)$$

Что касается величины μ [см. (36)], то она в интересующей нас области $E + E_0 < V < \infty$ изменяется от 0 до ∞ ; при этом, однако, всегда $|\lambda \mp \mu| \gg |\nu|$.

В силу (50а) и (50б) выражение (50) принимает более простой вид:

$$|D_{0,1}|^2 = \left| \frac{\Gamma(2\mu + 1)}{-2\nu \Gamma(\mu \pm \lambda) \Gamma(\mu \mp \lambda + 1)} \right|^2,$$

т. е. на основании формулы (7) дополнения 7 (λ и μ в данном случае — чисто мнимые)

$$|D_{0,1}|^2 = \frac{|\mu|}{2\pi |\nu|^2} \left| \frac{\mu \pm \lambda}{\mu \mp \lambda} \right| \frac{|\sin \pi(\mu \pm \lambda) \sin \pi(\mu \mp \lambda)|}{|\sin 2\pi\mu|}. \quad (51)$$

Входящее сюда отношение синусов равно

$$\frac{\cos 2\pi\lambda - \cos 2\pi\mu}{2|\sin 2\pi\mu|},$$

что, пренебрегая показательными функциями с отрицательным показателем, можно приближённо представить в виде

$$\frac{1}{2} \frac{e^{2\pi|\lambda|} - e^{2\pi|\mu|}}{e^{2\pi|\mu|}} \sim e^{2\pi(|\lambda| - |\mu|)}. \quad (51а)$$

Прочие множители в (51) мало меняются по сравнению с этим показательным множителем. Следовательно, он определяет в соответствии с (48) и величину коэффициента прохождения D , так как там тоже все прочие члены (и в числителе и в знаменателе) оказываются несущественными. Мы имеем, таким образом:

$$D \sim e^{-2\pi(|\lambda| - |\mu|)},$$

или, раскрывая значения λ и μ :

$$D \sim e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega a} (V - \sqrt{(V-E)^2 - E_0^2})}. \quad (52)$$

Это и есть окончательный результат работы Заутера.

На границах интересующей нас области ($V = E + E_0$ и $V = \infty$) выражение (52) принимает вид:

$$e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega a} (E + E_0)} \quad \text{и соответственно} \quad e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega a} E}.$$

Поскольку $E > E_0$, оба эти выражения меньше, чем

$$e^{-\frac{2\pi}{\hbar\omega a} E_0} = e^{-\pi \frac{b}{\lambda_0 c}}. \quad (52a)$$

Таким образом, вместе с ростом отношения b/λ_0 уменьшается коэффициент прохождения D . В такой же мере исчезает и парадокс Клейна, а следовательно, и обусловленное им затруднение теории Дирака.

Представляется целесообразным в соответствии с предположением, ещё раньше высказанным Бором, принять условие $b > \lambda_0$ в качестве постулата. В словесной формулировке это означает, что невозможно создать такое силовое поле, которое на отрезке длиной λ_0 сообщило бы электрону энергию, превышающую E_0 . Обозначая соответствующую критическую напряжённость поля через $E_{\text{крит}}$, мы имеем:

$$eE_{\text{крит}} \lambda_0 = E_0, \quad E_{\text{крит}} = \frac{m_0^2 c^2}{e\hbar}. \quad (53)$$

В соответствии с нашим исследованием парадокса Клейна теория Дирака применима только для полей $|E| < E_{\text{крит}}$. Можно, однако, пойти ещё дальше, отрицая справедливость и классической электродинамики в области $|E| > E_{\text{крит}}$. В работе Гейзенберга и Эйлера, цитированной на стр. 277, как раз и делалась попытка, основываясь на теории Дирака, обобщить электродинамику на случай чрезвычайно сильных полей. Заметим в связи с этим, что «на границе электрона» (радиус электрона $r = \frac{e^2}{m_0 c^2}$) напряжённость кулоновского поля должна была бы быть ещё больше, чем критическая, а именно:

$$E_r = \frac{e}{r^2} = \frac{m_0^2 c^4}{e^3} = 2\pi \cdot 137 E_{\text{крит}}. \quad (54)$$

Таким образом, в области, непосредственно граничащей с электроном, классическая электродинамика явно оказывается несостоятельной, что соответствует сейчас всеобщему убеждению.

§ 12. ПОЛЯРИЗАЦИЯ ВОЛН МАТЕРИИ

В начале развития теории Дирака казалось соблазнительным найти волномеханический аналог двум направлениям поляризации световой волны. Можно ли сравнить их с двумя направлениями спина электронной волны? Не говоря уже о том, что спин имеет неэлектромагнитную природу, это

сравнение рушится в следующем пункте: при поляризации световых волн мы имеем дело с двумя взаимно перпендикулярными ориентациями, в то время как в случае электронного спина речь идёт о взаимно противоположных направлениях. Достаточно вспомнить, например, опыт Штерна — Герлаха, когда спин ориентируется или параллельно или антипараллельно магнитному полю. Мы увидим, однако, что в других отношениях между обоими явлениями имеется определённая аналогия. Поэтому мы будем, как это обычно делается, применять термин «поляризация» (и без того уже имеющий много значений) и к электронным волнам, понимая под ним то или иное преимущественное направление спина.

Прежде чем исследовать вопрос о возможности экспериментального обнаружения такого преимущественного направления, обсудим, как определить его теоретически.

Будем исходить из § 2, где был введён оператор спина (13):

$$\sigma_x = -i\gamma_{23}, \quad \sigma_y = -i\gamma_{31}, \quad \sigma_z = -i\gamma_{12}. \quad (1)$$

Применим этот оператор к произвольной функции ψ и рассмотрим задачу о собственных значениях

$$\sigma_k \psi = \varepsilon \psi, \quad k = x, y, z. \quad (2)$$

Мы покажем сейчас, что собственное значение ε может быть равно только $+1$ или -1 . Действительно, итерируя (2), получаем:

$$\sigma_k^2 \psi = \varepsilon^2 \psi. \quad (3)$$

Но в силу (1) $\sigma_k^2 = -\gamma_{im}^2 = +1$; поэтому из (3) вытекает $\varepsilon = \pm 1$. Таким образом, решая уравнение (2) для случая оси k (что необходимо при анализе опыта Штерна — Герлаха) можно установить только, направлен ли спин параллельно ($\varepsilon = +1$) или антипараллельно ($\varepsilon = -1$) данной оси. В обоих случаях говорят о полной поляризации по оси k . Аналогично может случиться, что собственная функция представляет собой линейную комбинацию функций ψ_I и ψ_{II} , отвечающих соответственно значениям $\varepsilon = +1$ и $\varepsilon = -1$:

$$\psi = a\psi_I + b\psi_{II}. \quad (4)$$

Эта собственная функция также *полностью поляризована*, но по направлению, отличному от оси k . Примеры этого будут приведены позднее в связи с уравнением (24).

Дело обстоит здесь так же, как и со световыми волнами, когда при наложении двух взаимно перпендикулярных колебаний получается опять *поляризованное* колебание. В оптическом случае, однако, мы имеем здесь, вообще говоря, не линейную, а эллиптическую поляризацию. Неполяризованные колебания в «естественном» свете получаются в оптике только при сложении некогерентных составляющих ψ_I и ψ_{II} , фазы которых никак не связаны друг с другом. При этом амплитуды колебаний ψ_I и ψ_{II} должны быть одинаковы; если они различны, то получается частично поляризованное колебание.

Это же справедливо и для электронных волн. Мы говорим о «естественном» электронном луче, если, как это обычно бывает в опыте, нам неизвестны фазовые соотношения между частными решениями ψ_I и ψ_{II} , каждое из которых соответствует определённой ориентации спина. Математически

это выражается в некогерентном сложении, например, токов и плотностей, обусловленных отдельными составляющими ψ_I и ψ_{II} . При этом и здесь в зависимости от отношения амплитуд ψ_I и ψ_{II} , мы получаем неполяризованные или частично поляризованные электронные волны.

Применим эту схему к простейшему случаю плоской волны, хотя, как мы увидим в дальнейшем (в гл. X), как раз в этом случае невозможно обнаружить спин с помощью обычных экспериментов по отклонению электронных пучков (в эффекте Зеемана или в опыте Штерна — Герлаха, при анализе которых и был открыт спин, мы имеем дело не со свободным электроном, описываемым плоской волной, а с электроном, связанным в атоме).

Пусть наша плоская волна распространяется вдоль оси z , так что $k_x = k_y = 0$. Тогда в соответствии с (4.2) и (4.9а) собственная функция имеет вид (мы опускаем временной множитель и множитель t):

$$\psi = (\gamma_3 k + \gamma_4 k_4 + ik_0) \Gamma e^{ikz}.$$

Если, как и раньше, выбрать делитель нуля в виде $\Gamma = \frac{1}{4}(1 + \gamma_4) \times (1 + i\gamma_{12})$, то содержащийся в одном из слагаемых множитель γ_4 можно включить в Γ , и тогда для ψ получается более простое выражение:

$$\psi = \psi_I = (\gamma_3 k + K) \Gamma e^{ikz}, \quad (5)$$

где

$$K = k_4 + ik_0 = i \frac{E + E_0}{\hbar c} \quad (6)$$

[мы воспользовались формулой (4.8)].

Посмотрим, не отвечает ли это состояние преимущественной ориентации спина по оси z (т. е. в «продольном» направлении). Для этой цели вычислим

$$\sigma_z \psi_I = -i\gamma_{12} (\gamma_3 k + K) \Gamma e^{ikz}. \quad (7)$$

Величину $i\gamma_{12}$ можно переставить с выражением в круглых скобках и затем объединить с имеющимся в Γ сомножителем $1 + i\gamma_{12}$. Таким образом, мы имеем:

$$\sigma_z \psi_I = -(\gamma_3 k + K) \Gamma e^{ikz} = -\psi_I. \quad (8)$$

В состоянии ψ_I электронная волна полностью поляризована по направлению, антипараллельному оси z .

Уже в § 5 мы видели, что помимо состояния, изображенного там формулой (5.45), имеется ещё одно, получающееся из (5.45), если в делитель нуля Γ включить дополнительный множитель γ_{81} . Общее решение уравнения Дирака для свободного электрона представляет собой линейную комбинацию этих двух частных решений. В нашем случае, когда волна распространяется вдоль оси z , это второе состояние описывается собственной функцией

$$\psi = \psi_{II} = (\gamma_3 k + K) \gamma_{81} \Gamma e^{ikz}. \quad (9)$$

Мы утверждаем, что оно соответствует обратному (по сравнению с ψ_I) направлению спина. Действительно, применим к ψ_{II} спиновый оператор $\sigma_z = -i\gamma_{12}$. Попрежнему $i\gamma_{12}$ можно переставить с выражением в круглых скобках, но при перестановке γ_{12} и γ_{81} возникает ещё множитель -1 . Таким образом, вместо (8) мы получаем:

$$\sigma_z \psi_{II} = +\psi_{II}. \quad (10)$$

т. е. в состоянии ψ_{II} электронная волна полностью поляризована параллельно оси z .

Можно было бы, далее, поставить задачу об изображении, например, плоской волны, распространяющейся вдоль оси z и поляризованной по оси x . Мы покажем сейчас, что такое состояние не может осуществляться.

Доказательство этого весьма просто. В соответствии со сказанным наложим условие

$$\sigma_k \psi = \varepsilon \psi, \quad k = x, y, z, \quad (11)$$

и допустим, что

$$L\psi = 0, \quad (12)$$

где L — оператор Дирака, специализированный для нашего частного случая плоской волны. Применим теперь к уравнению (12) оператор σ_k , а к (11) — оператор L . Мы получим:

$$\sigma_k L\psi = 0, \quad L\sigma_k \psi = \varepsilon L\psi = 0. \quad (13)$$

Следовательно, справедливо и равенство

$$(\sigma_k L - L\sigma_k)\psi = 0. \quad (14)$$

В применении к плоской волне $\psi = A\Gamma e^{ikz}$, оператор L в соответствии с (2.4) имеет вид (мы, как и раньше, включаем γ_4 в Γ и опускаем множитель i):

$$L = \gamma_3 k + K', \quad K' = k_4 - ik_0. \quad (15)$$

Очевидно, $\sigma_x = -i\gamma_{12}$ коммутирует с оператором (15) [в смысле уравнения (14)]. Этим обстоятельством мы уже фактически пользовались выше, так как аналогично составленные выражения фигурируют в правых частях равенств (4) и (9). Поэтому наши предыдущие результаты относительно точной ориентации спина в *продольном* направлении являются вполне понятными. С другой стороны, операторы

$$\sigma_x = -i\gamma_{23}, \quad \sigma_y = -i\gamma_{31}$$

не перестановочны с L . В самом деле, мы имеем:

$$\sigma_x L - L\sigma_x = -2i\gamma_2 k, \quad (16)$$

$$\sigma_y L - L\sigma_y = +2i\gamma_1 k. \quad (16a)$$

Согласно (14) левые части этих равенств, будучи умножены на функцию ψ , должны обращаться в нуль. Из рассмотрения правых частей, однако, ясно видно, что это не имеет места. Отсюда и следует, что не может существовать состояния, описываемого плоской волной с точной ориентацией спина в *поперечном* направлении. Попытка осуществить его, специально подбирая коэффициенты a и b в (4), обречена на неудачу.

Иначе обстоит дело, если измерять спин не в покоящейся системе координат (x, y, z) , а в системе, движущейся вместе с электроном (x', y', z') , накладывая, например, условие

$$\sigma'_x \psi = \varepsilon \psi,$$

а не

$$\sigma_x \psi = \varepsilon \psi.$$

Дело в том, что в движущейся системе $k = 0$, и потому равенства (14) и (16) совместны. Таким образом, следует ожидать, что окажется возможным указать волновую функцию ψ , которая в системе x, y, z описывает

плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси z , и в то же время в системе x', y', z' соответствует точно заданному («квантованному») значению x -компоненты спина ($\sigma'_\omega = +1$ или -1).

Переход от одной системы координат к другой совершается с помощью преобразования Лоренца:

$$z' = \frac{z - \beta ct}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad y' = y \quad \text{и т. д.} \quad (17)$$

Встанем на точку зрения А) § 6, т. е. будем преобразовывать величины γ как компоненты четырёхмерного вектора (роль ict играет γ_4), оставляя функцию ψ инвариантной. Таким образом, мы имеем на основании (17)

$$\begin{aligned} \gamma'_3 &= \frac{\gamma_3 + i\beta\gamma_4}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \gamma'_2 = \gamma_2 \quad \text{и т. д.,} \\ \sigma'_\omega &= -i\gamma'_2\gamma'_3 = \frac{-i}{\sqrt{1 - \beta^2}} \gamma_2(\gamma_3 + i\beta\gamma_4). \end{aligned}$$

Пользуясь (5) и (9), получаем, несколько преобразуя произведения величин γ :

$$\left. \begin{aligned} \sigma'_\omega \psi_I &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ (k + i\beta K) \gamma_1 + (K - i\beta k) \gamma_{13} \} \Gamma e^{iks}, \\ \sigma'_\omega \psi_{II} &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ (k + i\beta K) \gamma_3 - (K - i\beta k) \} \Gamma e^{iks}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Для K [см. (6)] и k мы имеем:

$$K = \frac{im_0c}{\hbar} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} + 1 \right), \quad k = \frac{m\nu}{\hbar} = \frac{m_0c}{\hbar} \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (19)$$

$$k + i\beta K = -\frac{m_0c}{\hbar} \beta, \quad K - i\beta k = \frac{im_0c}{\hbar} (1 + \sqrt{1 - \beta^2}). \quad (20)$$

Подставляя эти выражения в (18), находим:

$$\left. \begin{aligned} \sigma'_\omega \psi_I &= \frac{m_0c}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ \beta\gamma_1 + i(1 + \sqrt{1 - \beta^2}) \gamma_{31} \} \Gamma e^{iks}, \\ \sigma'_\omega \psi_{II} &= \frac{m_0c}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ \beta\gamma_3 + i(1 + \sqrt{1 - \beta^2}) \} \Gamma e^{iks}. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

С другой стороны, из (5), (9) и (19) вытекает:

$$\left. \begin{aligned} \psi_I &= \frac{m_0c}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ \beta\gamma_3 + i(1 + \sqrt{1 - \beta^2}) \} \Gamma e^{iks}, \\ \psi_{II} &= \frac{m_0c}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \{ \beta\gamma_1 + i(1 + \sqrt{1 - \beta^2}) \gamma_{31} \} \Gamma e^{iks}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Следовательно,

$$\sigma'_\omega \psi_I = \psi_{II}, \quad \sigma'_\omega \psi_{II} = \psi_I.$$

Таким образом, полагая

$$\psi_1 = \psi_I + \psi_{II}, \quad \psi_2 = \psi_I - \psi_{II},$$

мы имеем:

$$\sigma'_\omega \psi_1 = +\psi_1, \quad \sigma'_\omega \psi_2 = -\psi_2. \quad (23)$$

Производя аналогичные вычисления для σ'_y , получаем, вводя обозначение $\psi_{1,2} = \psi_1 \mp i\psi_{II}$:

$$\sigma'_y \psi_{1,2} = \pm \psi_{1,2}. \tag{23a}$$

Таким образом, мы показали, что существуют волны, распространяющиеся вдоль оси z и поляризованные параллельно и антипараллельно оси x' или y' . Они получаются из общей формулы (4), если в последней положить

$$\left. \begin{aligned} b &= \pm a \text{ (поляризация по оси } x'), \\ b &= \mp ia \text{ (поляризация по оси } y'). \end{aligned} \right\} \tag{24}$$

В общем случае при $|b| = |a|$ имеет место поперечная поляризация в произвольном направлении; при $|b| \neq |a|$ поляризация не поперечная.

Из всего изложенного видно, как надо производить вычисления со спиновым оператором. Исследуем теперь, как можно обнаружить спин, экспериментально исследуя электронные волны. Как уже было отмечено на стр. 284, в опытах по отклонению электронных пучков нельзя измерить спин свободного электрона: электрон должен хотя бы на некоторое время оказаться в связанном состоянии.

Мы рассмотрим только два возможных эксперимента¹⁾ — аналог классического опыта Баркла с рентгеновскими лучами и аналог опыта Малюса в оптике.

А. Аналог опыта Баркла. В опыте Баркла (1905), в котором впервые была обнаружена поляризация рентгеновских лучей и тем самым было доказано, что они представляют собой поперечные волны, исследовалось «двойное рассеяние». Если первичный луч 1 не поляризован, то первый рассеивающий объект K играет роль поляризатора, а второй K' — роль анализатора. Угол рассеяния удобнее выбирать прямыми. Тогда вторичный луч 2 оказывается поляризованным перпендикулярно к плоскости рассеяния ($1, 2$) (направление поляризации соответствует электрическому вектору). Это сказывается на интенсивности третичного излучения, которая зависит от направления в плоскости ($1, 3$), перпендикулярной ко вторичному лучу. Именно, в направлении 3 , перпендикулярном к 1 и 2 , интенсивность третичного излучения равна нулю, а в направлении, параллельном или антипараллельном 1 , она максимальна.

Опишем теперь аналогичный опыт с электронными лучами. Посмотрим прежде всего, чего здесь следует ожидать с чисто теоретической точки зрения. При этом заменим тела K и K' тонкими плёнками какого-нибудь тяжёлого металла (для краткости будем говорить просто об атомах золота; см. рис. 20). Пусть первичный луч 1 не поляризован (все направления спина в нём равновероятны). Во вторичном луче 2 спин ориентирован преимущественно перпендикулярно к плоскости рисунка (луч частично поляризован). Это обстоятельство сказывается на интенсивности третичного луча, изменяющейся в зависимости от направления в плоскости, перпендикулярной к 2 : в направлении, антипараллельном первичному лучу 1 , эта интенсивность имеет максимум, в параллельном — минимум; в направле-

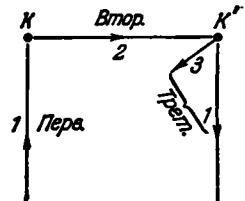


Рис. 20. Аналог опыта Баркла.

¹⁾ См. в связи с этим более общее рассмотрение вопроса в работе: E. Fuess и H. Hellmann, Phys. Zs. 31, 465 (1930).

нии, перпендикулярном как к l , так и к z' , она принимает некоторое среднее значение. Математически интенсивность третичного луча с точностью до постоянного множителя даётся формулой

$$J = 1 + \delta \cos \varphi, \quad \delta = (\alpha Z)^2 \frac{\beta^2 (1 - \beta^2)}{(2 - \beta^2)^2} (\ln 2)^2, \quad (25)$$

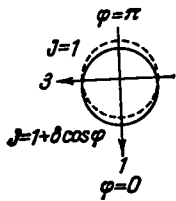
где φ — угол [в плоскости (l, z)] между первичным лучом и направлением наблюдения. На рис. 20а представлена полярная диаграмма интенсивности J (она имеет вид эксцентрического овала).

Из формулы (25) следует, что для обнаружения поляризации электронных волн, во-первых, надо изучать рассеяние электронов на тяжёлых атомах (фактор Z^2); во-вторых, надо брать быстрые, но не слишком быстрые электроны [множитель $\frac{\beta^2 (1 - \beta^2)}{(2 - \beta^2)^2}$ имеет максимум при $\beta^2 = 2 - \sqrt{2}$, $\beta \sim 0,8$;

в-третьих, при интерпретации результатов надо основываться на уравнении Дирака (фактор α).

Формула (25) представляет собой результат тщательных вычислений Мотта¹⁾, которые были в дальнейшем упрощены Заутером²⁾. Мы вынуждены отказаться от её вывода, так как здесь речь идёт о релятивистском эффекте второго порядка [в смысле нашего приближения в гл. V, § 8; действительно, порядок наблюдаемой величины определяется в данном случае множителем $(\alpha Z)^2$, в то время как мы будем рассматривать только эффекты первого порядка по αZ]. Впрочем, поскольку для золота $(\alpha Z)^2 = 0,35$, даже и второе приближение оказывается недостаточным для количественных расчётов; поэтому Мотту пришлось численными методами определять поправки к формуле (25).

Рис. 20а. Полярная диаграмма интенсивности третичного луча.



Таким образом, теоретически должен иметь место эффект поляризации, проявляющийся в небольшом изменении интенсивности третичного луча при изменении угла φ от нуля до π . Разность между максимальной и минимальной интенсивностями составляет 2δ , что, по оценке Мотта, в лучшем случае достигает 16%. В противоположность этому в экспериментальных работах Даймонда³⁾ и Томсона⁴⁾ эта разность оказалась менее 2%. Неизвестно, обусловлено ли это расхождение несовершенством теории Дирака для высших приближений или недостаточной точностью численных расчётов Мотта⁵⁾.

Б. Аналог опыта Малюса. Нам предстоит рассмотреть следующую задачу: имеется потенциальный барьер $V(x)$ [$V(x) = 0$ при $x < 0$ и имеет произвольный вид при $x > 0$]. На него падает (в плоскости x, y) плоская волна, состоящая из которой, в силу сказанного, не зависит от z . Вдали от барьера направления распространения падающей и отражённой волн задаются

1) N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. 124, 425 (1929); 135, 429 (1932).

2) F. Sauter, Ann. d. Phys. 18, 61 (1933).

3) E. G. Dymond, Proc. Roy. Soc. 136, 638 (1932); 145, 657 (1934).

4) G. P. Thomson, Phil. Mag. 17, 1058 (1934); также F. E. Myers, J. F. Byrne a. R. T. Cox, Phys. Rev. 46, 777 (1934). Дальнейшую литературу по данному вопросу см. в тщательно выполненной работе Рихтера [H. Richter, Ann. d. Phys. 28, 533 (1937)], которая также дала отрицательный результат.

5) Неудачи многих попыток обнаружения поляризации электронов были связаны с многократным рассеянием электронов в мишенях. Эффект асимметрии при двойном рассеянии отчётливо наблюдался Шеллом, Чейзом и Майерсом [Schull, Chase, a. Myers, Phys. Rev. 63, 29 (1943)]. (Прим. ред.)

соответственно составляющими волнового вектора k_1 и k_2 , $k_3 = 0$ и $-k_1$, k_2 , $k_3 = 0$.

Поскольку волновая функция не зависит от z , из уравнения Дирака (2.4) выпадает γ_3 , и мы имеем:

$$\begin{aligned} \gamma_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \gamma_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + (i\gamma_4 k_4 + k_0) \psi &= 0, \\ k_4 &= i \frac{E - V(x)}{\hbar c}, \quad k_0 = \frac{E_0}{\hbar c} = \text{const.} \end{aligned} \quad (26)$$

Пользуясь для приведения нашим обычным делителем нуля $\Gamma = \frac{1}{4}(1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12})$, мы можем исключить из выражения для ψ множитель γ_4 , а также либо γ_2 , либо γ_1 . Выберем последнюю возможность, соответственно представив ψ двучленной формулой

$$\psi = (\psi_0 + \gamma_2 \psi_2) \Gamma. \quad (27)$$

Поскольку коэффициенты уравнения (26) не содержат y , можно считать, что волновая функция ψ зависит от y экспоненциально. Таким образом, положим в соответствии со смыслом величины k_2 :

$$\psi \text{ пропорционально } e^{ik_2 y}, \text{ т. е. } \frac{\partial \psi}{\partial y} = ik_2 \psi.$$

Тогда

$$\gamma_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} = ik_2 (\psi_2 + \gamma_2 \psi_0) \Gamma. \quad (27a)$$

Далее мы имеем, преобразуя соответствующим образом произведения величин γ (заменяя, например, γ_1 на $i\gamma_2 \cdot i\gamma_{12}$ и т. д.):

$$\gamma_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} = i \frac{\partial}{\partial x} (-\psi_2 + \gamma_2 \psi_0) \Gamma, \quad (27б)$$

$$i\gamma_4 k_4 \psi = ik_4 (\psi_0 - \gamma_2 \psi_2) \Gamma, \quad (27в)$$

$$k_0 \psi = k_0 (\psi_0 + \gamma_2 \psi_2) \Gamma. \quad (27г)$$

Складывая почленно уравнения (27а, б, в, г) и приравнявая нулю отдельно коэффициенты при 1 и γ , получаем два уравнения для функций ψ_0 и ψ_2 :

$$\left. \begin{aligned} (k_2 - \frac{\partial}{\partial x}) \psi_2 + (k_4 - ik_0) \psi_0 &= 0, \\ (k_2 + \frac{\partial}{\partial x}) \psi_0 - (k_4 + ik_0) \psi_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Для интегрирования этой системы положим ¹⁾:

$$\varphi_0 = \frac{1}{2} (\psi_0 + \psi_2), \quad \varphi_2 = \frac{1}{2} (\psi_0 - \psi_2). \quad (29)$$

Тогда, комбинируя соответствующим образом уравнения (28), найдём:

$$\left. \begin{aligned} (k_2 - ik_0) \varphi_0 + (k_4 + \frac{\partial}{\partial x}) \varphi_2 &= 0, \\ (k_2 + ik_0) \varphi_2 - (k_4 - \frac{\partial}{\partial x}) \varphi_0 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

¹⁾ Здесь и в дальнейшем мы следуем работе Н. Неймана, *Zs. f. Phys.* 96, 247 (1935).

Исключая отсюда φ_2 (φ_0), получим для φ_0 (φ_2) дифференциальное уравнение, коэффициенты которого не зависят от знака k_2 . В частности, для φ_0 мы имеем:

$$(k_2^2 + k_0^2)\varphi_0 + \left(k_4 + \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(k_4 - \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0 = 0. \quad (31)$$

Зная φ_0 , можно на основании второго уравнения (30) определить и φ_2 :

$$\varphi_2 = \frac{\left(k_4 - \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0}{k_2 + ik_0}.$$

Тогда формулы (29) дают:

$$\left. \begin{matrix} \psi_0 \\ \psi_2 \end{matrix} \right\} = \left(1 \pm \frac{k_4 - \frac{\partial}{\partial x}}{k_2 + ik_0}\right)\varphi_0. \quad (32)$$

Нам будет достаточно решить уравнение (31) только для отрицательных значений x , когда $V(x) = 0$.

В этой области (31) принимает вид ¹⁾:

$$\left(k_2^2 + k_0^2 + k_4^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi_0 = -\left(k_1^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi_0 = 0 \quad (33)$$

и имеет общее решение

$$\varphi_0 = e^{ik_2 x} (Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}) \quad (34)$$

(мы включаем сюда и найденную ранее зависимость φ_0 от y).

Отношение констант A и B можно найти, только решая уравнение (31) во всей области изменения x , для чего необходимо сделать определённые предположения относительно функции $V(x)$.

Теперь из (34) и (32) находим:

$$\left. \begin{matrix} \psi_0 \\ \psi_2 \end{matrix} \right\} = \frac{e^{ik_2 x}}{k_2 + ik_0} [A(k_2 + ik_0 \pm k_4 \mp ik_1)e^{ik_1 x} + + B(k_2 + ik_0 \pm k_4 \pm ik_1)e^{-ik_1 x}]. \quad (35)$$

Первое слагаемое здесь представляет собой падающую, а второе — отражённую волну. Отношение соответствующих интенсивностей определяет коэффициент отражения R (следует иметь в виду, что k_4 — чисто мнимая величина; $k_4 = i|k_4|$):

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \left| \frac{k_2 + i(k_0 \pm |k_4| \pm k_1)}{k_2 + i(k_0 \pm |k_4| \mp k_1)} \right|^2 = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \frac{(k_1 + |k_4| \pm k_0)^2 + k_2^2}{(k_1 - |k_4| \mp k_0)^2 + k_2^2}. \quad (36)$$

Как видно из последнего из написанных выражений [и, как и следовало ожидать, исходя из (31)], R не зависит от знака k_2 .

Из двух функций ψ_0 и ψ_2 первая является «большой», а вторая — «малой». Действительно, порядок величины функций ψ_0 и ψ_2 , в силу (35), определяется абсолютными значениями выражений

$$ik_0 + k_4 = i \frac{E_0 + E}{\hbar c} \quad \text{и соответственно} \quad ik_0 - k_4 = i \frac{E_0 - E}{\hbar c}.$$

¹⁾ Преобразование, произведённое в (33), основано, очевидно, на законе сохранения энергии (4.8а), который в данном случае записывается в виде: $k_1^2 + k_2^2 + k_4^2 + k_0^2 = 0$.

В нерелятивистском приближении второе из этих выражений обращается в нуль, а первое оказывается порядка $\frac{mc}{h}$ и при $v \ll c$ значительно превышает волновые числа k_1 и k_2 (последние по порядку величины равны $\frac{mv}{h}$). Естественно, к тому же выводу ($\psi_0 \gg \psi_2$) можно было бы придти и по образцу стр. 236, исходя непосредственно из уравнений (28). Итак, вместо (27) можно приближённо написать:

$$\psi = \psi_0 \Gamma. \quad (37)$$

Посмотрим теперь, как ориентирован спин по отношению к плоскости падения (x, y). Для этого надо подействовать на нашу волновую функцию ψ спиновым оператором $\sigma_z = -i\gamma_{12}$. Представляя ψ в сокращённой форме (37), мы получаем немедленно:

$$\sigma_z \psi = -i\gamma_{12} \psi_0 \Gamma = -\psi_0 \Gamma = -\psi. \quad (38)$$

Таким образом, собственное значение оператора спина σ_z оказывается равным -1 , т. е. спин ориентирован антипараллельно оси z .

Этот вывод оказывается справедливым не только *приближённо* (в пренебрежении функцией ψ_2 по сравнению с ψ_0), но и *точно*, если только вычислять значение z -компоненты спина в системе координат, движущейся вместе с электроном. Правда, соответствующее преобразование Лоренца [см. выше формулу (17)] следует производить отдельно для падающей и для отражённой волны, т. е. в (35) надо положить либо $B=0$, либо $A=0$. Действительно, скорости падающего и отражённого электрона (определяющиеся соответственно величинами k_1, k_2 и $-k_1, k_2$) направлены в разные стороны. Расчёт протекает в принципе так же, как и на стр. 286, и в результате получается:

$$\sigma_z^{\psi}_{\text{пад}} = -\psi_{\text{пад}}; \quad \sigma_z^{\psi}_{\text{отр}} = -\psi_{\text{отр}}. \quad (39)$$

Здесь под ψ следует понимать всё выражение (27), но только при условии, что $B=0$ или соответственно $A=0$.

Далее, как и на стр. 284, рассматривая решение (27), мы убеждаемся, что оно ещё не обладает должной общностью. Как и в (9), необходимое второе решение, соответствующее противоположной ориентации спина, получается, если просто ввести в (27) дополнительный множитель γ_3 , т. е. положить:

$$\psi = (\gamma_3 \psi_1 + \gamma_{32} \psi_2) \Gamma. \quad (40)$$

Линейная комбинация (27) и (40) представляет собой общее решение, т. е. полное (четырёхчленное) выражение, соответствующее данному делителю нуля Γ .

В самом деле, подействовав на функцию (40) оператором Дирака (26) и приравняв затем нулю коэффициенты при γ_3 и γ_{32} , мы получим два уравнения, отличающихся от (28) только заменой $\psi_0, \psi_1, +k_1$ на $\psi_{32}, \psi_3, -k_2$. Следовательно, если вновь ввести по аналогии с (29) функции φ_0 и φ_3 , определив их как сумму и разность ψ_{32} и ψ_3 , то для φ_0 мы будем иметь точно прежнее уравнение (31), которое, как уже отмечалось, инвариантно относительно изменения знака k_2 (оно попрежнему будет необходимо для вычисления отношения $A:B$). Равным образом и выражение (36) для коэффициента отражения R , как мы специально подчёркивали, инвариантно относительно изменения знака k_2 . Далее, ψ_{32} , будучи аналогом ψ_0 , является «большой»

функцией, и потому вместо (40) можно приближённо написать:

$$\psi = \gamma_{32}\psi_{32}\Gamma. \quad (41)$$

Применяя к этому выражению оператор σ_z , находим:

$$\sigma_z\psi = -i\gamma_{12}\gamma_{32}\psi_{32}\Gamma = +\gamma_{32}\psi_{32}\Gamma = +\psi. \quad (42)$$

Таким образом, состояние (40) приближённо соответствует собственному значению σ_z , равному $+1$. Как и раньше, этот результат также можно уточнить в смысле (39). Именно, если вновь разделить волновую функцию на падающую и отражённую волны и для каждой из них вычислить значение z -компоненты спина в движущейся вместе с электроном системе координат, то мы получим точно $+1$.

Обратимся теперь к опыту Малюса в оптике. В плоскости (x, y) падает неполяризованный луч. Представим его как результат наложения двух поляризованных лучей, фазы которых никак не связаны друг с другом. Одна из этих составляющих поляризована параллельно, а другая — перпендикулярно к оси z . Коэффициенты отражения для них оказываются различными. Поэтому получающийся в результате их сложения полный отражённый луч оказывается поляризованным (вообще говоря, частично, а в особом случае угла полной поляризации — полностью).

Соответствующий опыт с волнами материи надо было бы представить себе следующим образом. Неполяризованный луч падает в плоскости (x, y) . Мы будем считать, что он состоит из двух составляющих (27) и (40) с независимыми фазами. Для одной из этих составляющих спин ориентирован в отрицательном направлении оси z , для другой — в положительном; мы можем также сказать, что один луч поляризован по $+z$, а другой по $-z$. Но коэффициенты отражения для обоих этих лучей одинаковы. Поэтому получающийся из обеих составляющих полный отражённый луч оказывается неполяризованным (обладает преимущественным направлением спина в столь же малой степени, как и падающий).

Итак, опыт Малюса должен, согласно теории, привести в электронной оптике к отрицательному результату, и притом для потенциального барьера любой формы.

ГЛАВА V ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 1. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА, ОСОБЕННО В СЛУЧАЕ ВЫРОЖДЕННЫХ СИСТЕМ

Среди многих прекрасных результатов квантовой механики теория возмущений, развитая Шредингером¹⁾, занимает выдающееся место. Она более проста, чем астрономическая теория возмущений классической механики, и в своих приложениях не ограничивается проблемой двух тел (спектр He, гл. IX).

А. Возмущение в невырожденном случае. Рассмотрим, следуя Шредингеру, некоторую задачу, волновое уравнение которой может быть решено точно, если пренебречь в уравнении возмущающими членами. Пусть ψ_k будут собственные функции невозмущенной задачи, W_k — соответствующие собственные значения. Последние предполагаются невырожденными. Предполагается, что волновое уравнение невозмущенной задачи взято в простейшей форме (это уравнение не зависит от времени и обладает интегралом энергии):

$$H\psi - Wp\psi = 0, \quad (1)$$

где H , так же как в гл. I, § 6, означает линейное дифференциальное выражение второго порядка в частных производных, которое мы будем предполагать самосопряженным (см. гл. I, § 7). Множитель p («весовая функция») добавлен потому, что при употреблении криволинейных координат q , наиболее подходящих для решения какой-либо конкретной задачи, в качестве множителя к W появится функциональный детерминант D . Вместо D выбрано более общее обозначение p для того, чтобы в соответствующем случае (см. эффект Штарка, § 2) включить и другие сомножители.

С учётом весового множителя условие ортогональности для двух собственных функций ψ_i, ψ_k с собственными значениями W_i, W_k ($W_i \neq W_k$) будет иметь вид:

$$\int \psi_i^* \psi_k p dq = 0, \quad (2)$$

где dq означает произведение дифференциалов координат q . Это условие, как обычно, следует из уравнения непрерывности (I. 7.21). Условие нормировки гласит:

$$\int \psi_k^* \psi_k p dq = 1. \quad (3)$$

При включении возмущения к выражению H добавляется член, характеризующий это возмущение. Пусть порядок малости этого члена определяется

¹⁾ Schrödinger, Ann. d. Phys. 80, 437 (1926).

параметром λ . Если это возмущение претерпевает потенциальная энергия V , то член возмущения просто умножается на ψ . При этом предположении можно написать:

$$H\psi - Wp\psi = -\lambda s\psi, \quad (4)$$

где под s понимается известная функция координат, определяемая характером возмущения.

Исходя из k -го собственного состояния, полагаем:

$$W = W_k + \lambda \varepsilon + \dots, \quad \psi = \psi_k + \lambda \varphi + \dots \quad (4a)$$

и, пренебрегая членами порядка λ^2 , из (4) получим:

$$H\psi_k + \lambda H\varphi - W_k p\psi_k - \lambda W_k p\varphi - \lambda \varepsilon p\psi_k = -\lambda s\psi_k.$$

Вследствие (1) сумма первого и третьего членов равна нулю. Поэтому, сокращая на общий множитель λ , будем иметь:

$$H\varphi - W_k p\varphi = (\varepsilon p - s)\psi_k. \quad (5)$$

Левая часть этого неоднородного уравнения имеет ту же форму, что и левая часть однородного уравнения (1). Величина ε , входящая в правую часть уравнения, пока неизвестна. Однако она может быть определена независимо от вычислений собственно теории возмущений на основании следующей общей теоремы: для того чтобы неоднородное уравнение (5) было разрешимо, т. е. имело непрерывное решение, необходимо, чтобы его правая часть была «ортогональна» к решению однородного уравнения, т. е. к собственной функции ψ_k .

Для доказательства необходимо левую и правую части уравнения (5) умножить на ψ_k^* и проинтегрировать по координатам. Слева будем иметь:

$$\int \psi_k^* (H\varphi - W_k p\varphi) dq. \quad (5a)$$

Этот интеграл можно преобразовать на основании формулы Грина, которую необходимо применить в следующей самосопряженной форме:

$$\int \psi_k^* H\varphi dq = \int \varphi H\psi_k^* dq + \dots$$

Вследствие того, что при удалении поверхности интегрирования на бесконечность, интегралы, обозначенные многоточием, исчезнут, из (5a) получается:

$$\int \varphi (H\psi_k^* - W_k p\psi_k^*) dq = 0 \quad [\text{ср. (1)}]. \quad (5b)$$

Поэтому левая часть уравнения (5) даёт нам:

$$\int \psi_k^* \left(\frac{s}{p} - \varepsilon \right) p\psi_k dq = 0. \quad (6)$$

Это равенство имеет вид условия ортогональности (2), если входящим в это условие ортогональным друг к другу функциям ψ_i и ψ_k сопоставить функции ψ_k и $\left(\frac{s}{p} - \varepsilon \right) \psi_k$. Но это как раз и означает, что правая часть неоднородного уравнения (5) должна быть ортогональна к решению соответствующего однородного уравнения.

Утверждение, содержащееся в равенстве (6), является краеугольным камнем теории интегральных уравнений. Однако оно было открыто Релеем

(теория звука) ранее построения теории интегральных уравнений, исходя из физического смысла. Поясним это на примере колеблющейся мембраны. Дифференциальное уравнение периодических собственных колебаний мембраны имеет вид:

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad k^2 = \frac{\rho \omega^2}{S}, \quad (7)$$

где ρ — поверхностная плотность, ω — круговая частота собственного колебания и S — напряжение, действующее в мембране. Если на мембрану действует внешнее, нормальное к поверхности мембраны, давление $P(x, y)$, распределённое каким угодно образом по поверхности мембраны и имеющее частоту ω , совпадающую с одной из частот собственных колебаний мембраны, то амплитуда колебаний мембраны будет беспрерывно возрастать. Это возрастание амплитуды колебаний привело бы к «резонансной катастрофе». Для того чтобы такая «резонансная катастрофа» не наступила, необходимо, чтобы давление P в целом не производило работы над колеблющейся мембраной. Следовательно, давление должно, например, быть приложенным к линиям узлов, либо должно в колеблющихся в противоположных направлениях секторах мембраны иметь одинаковую величину и т. д. Поскольку $P d\sigma$ есть сила, а u — смещение из положения равновесия, общее математическое выражение этого требования равенства нулю производимой давлением работы будет иметь вид:

$$\int P u d\sigma = 0. \quad (7a)$$

В применении к рассматриваемому случаю положим P равным возмущению ($s - sp$) ψ_k , $u = \psi_k^*$ и $d\sigma = dq$. Тогда равенство (7a) примет вид равенства (6). Приведённый пример показывает, что представление об «ортогональности возмущения» может быть сделано физически содержательным, если мы скажем, что «возмущение действует, не производя работы».

Теперь из (6) сразу следует, что

$$s = \frac{\int s \psi_k^* \psi_k dq}{\int p \psi_k^* \psi_k dq}, \quad (8)$$

или, поскольку функция ψ_k должна быть нормирована согласно условию нормировки (3), окончательно будем иметь:

$$s = \int s \psi_k^* \psi_k dq. \quad (8a)$$

Иначе говоря, энергия возмущения s есть «волномеханическое среднее» функции возмущения s , причём выражение «волномеханическое среднее» употреблено в смысле гл. III, § 2, а усреднение должно быть произведено при помощи функций ψ_k невозмущённого состояния.

Определённое таким образом значение s подставим в правую часть уравнения (5) и разложим эту правую часть, предварительно разделив её на p , по волновым собственным функциям ψ_k невозмущённой задачи. Это разложение будет иметь вид:

$$\left(\frac{s}{p} - s\right) \psi_k = \sum A_i \psi_i. \quad (9)$$

Аналогичным образом представим искомую функцию φ в виде:

$$\varphi = \sum B_i \psi_i. \quad (10)$$

Отсюда на основании (1) получим:

$$H\varphi = \sum_l B_l W_l p^{\psi_l}.$$

Уравнение (5) принимает вид:

$$\sum_l B_l (W_l - W_k) p^{\psi_l} = -p \sum_l A_l \psi_l.$$

Из сравнения коэффициентов следует, что

$$B_l = \frac{A_l}{W_k - W_l} \quad (10a)$$

и, следовательно, вместо (10) будем иметь:

$$\varphi = \sum_l \frac{A_l \psi_l}{W_k - W_l}. \quad (11)$$

Коэффициенты A_l вычисляются обычным образом по способу Фурье из равенства (9) путём умножения последнего на ψ_l^* и интегрирования по координатам; тогда с учётом (2) и (3) после выполнения почленного интегрирования найдём:

$$A_l = \int \psi_l^* (s - \varepsilon p) \psi_k dq = \begin{cases} \int s \psi_l^* \psi_k dq & \text{ввиду (2) для } l \neq k, \\ 0 & \text{ввиду (6) для } l = k. \end{cases} \quad (12)$$

Тем самым возмущённая задача решена весьма наглядным образом: подстановка (8a), (11) и (12) в (4a) для возмущённых собственных значений и возмущённых собственных функций даст результат:

$$\left. \begin{aligned} W &= W_k + \lambda \int s \psi_k^* \psi_k dq \dots, \\ \psi &= \psi_k + \lambda \sum_l' \frac{\psi_l \int s \psi_l^* \psi_k dq}{W_k - W_l} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Штрих у знака суммы означает, что при суммировании должен быть опущен член с $k = l$. В этом случае знаменатель $W_k - W_l$ обратился бы в нуль и одновременно вследствие (12) обратился бы в нуль и числитель, так что в целом соответствующий член остаётся неопределённым. Но вследствие того, что этот член пропорционален ψ_k , мы можем считать его включённым в невозмущённую функцию ψ_k . Члены, обозначенные в (13) многоточием, являются членами более высокого порядка малости, пропорциональными $\lambda^2, \lambda^3, \dots$

Остаётся сказать несколько слов относительно возможности разложений (9) и (10). Эта возможность хорошо известна для специальных случаев (тригонометрические и шаровые функции) и в математической литературе, особенно в теории интегральных уравнений, доказана для произвольных собственных функций при некоторых ограничениях, накладываемых на подлежащую разложению функцию. Здесь же необходимо лишь подчеркнуть, что система собственных функций должна быть полной. В самом деле, нельзя, например, в ряде Фурье опустить какой-либо член и без этого члена представить этим рядом произвольную функцию. Полная система собственных функций может включать в себя, вообще говоря, как функции дискретного, так и непрерывного спектра собственных значений. Поэтому суммирование в (13) в общем

случае включает в себя также и интеграл по непрерывному спектру собственных значений. Для дальнейшего применения мы выпишем соответствующую формулу в явном виде, обозначив непрерывный параметр энергии через w и принадлежащую ему собственную функцию через $\psi(w)$:

$$\psi = \psi_k + \lambda \sum_i \frac{\psi_i \int s \psi_i^* \psi_k dq}{W_k - W_i} + \lambda \int \frac{\psi(w) \int s \psi^*(w) \psi_k dq}{W_k - w} dw. \quad (13a)$$

Б. Возмущение в случае кратных собственных значений. Изложенный метод позволяет рассмотреть ряд важнейших задач теории возмущений, например, эффект Штарка (§ 2) и теорию дисперсии (§ 3). Однако всё изящество теории возмущений Шредингера выявляется лишь в применении к случаям вырожденных систем, т. е. к таким случаям, когда собственные значения невозмущенной задачи вырождены.

Исходя из уравнения (1), предположим, что собственному значению W_k принадлежат несколько линейно-независимых собственных функций

$$\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{ki}, \dots, \psi_{ka}.$$

В этом случае, как и на стр. 38, мы говорим об $(a-1)$ -кратном вырождении. Принимается, что эти собственные функции ψ_{ki} нормированы на 1 и не только ортогональны к собственным функциям с другим индексом k , но и ортогонализированы между собой. Этими требованиями они определены не однозначно. Эти функции можно подвергнуть произвольному ортогональному преобразованию. Получающиеся в результате этого ортогонального преобразования функции также будут удовлетворять вышеуказанным условиям. В самом деле, обозначая через β коэффициенты произвольного ортогонального преобразования в пространстве a измерений, положим:

$$\psi_{kb} = \sum_{i=1}^a \beta_{hi} \psi_{ki} \quad (14)$$

и также

$$\psi_{kh}^* = \sum_{j=1}^a \beta_{h'j}^* \psi_{kj}^*. \quad (14a)$$

Вычисляя интегралы условий (2) и (3) с получающимися в результате преобразования функциями ψ_{kb} , ψ_{kh}^* и учитывая, с одной стороны, ортогональность ψ_{ki} , а с другой стороны — то обстоятельство, что коэффициенты β являются коэффициентами ортогонального преобразования, будем иметь:

$$\int \psi_{kb} \psi_{kh}^* p dq = \sum_i \sum_j \beta_{hi} \beta_{h'j}^* \int \psi_{ki} \psi_{kj}^* p dq = \sum_i \beta_{hi} \beta_{h'i}^* = \delta_{hb}.$$

Таким образом, условия (2) и (3) выполнены для ψ_{kb} , коль скоро они выполнены для ψ_{ki} . Эта произвольность в выборе собственных функций используется весьма изящно в теории возмущений Шредингера.

Существование кратных собственных значений хорошо известно из классической механики, особенно из теории колебаний мембран. В качестве простейшего случая рассмотрим прямоугольную мембрану с закреплёнными краями $x=0$ и a , $y=0$ и b . Тогда с точностью до произвольного множителя решение уравнения (7) будет иметь вид:

$$u = \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{n\pi y}{b}.$$

Соответствующее собственное значение на основании (7) будет равно

$$k_{m, n}^2 = \pi^2 \left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} \right).$$

Если a и b несоизмеримы, то это собственное значение будет простым, так как в этом случае не существует двух таких целых чисел m и n , которые приводили бы к одинаковому значению для k .

Иначе обстоит дело в случае квадратной мембраны $b = a$ (или в более общем случае соизмеримых сторон). В этом случае мы получим:

$$k_{m, n}^2 = \frac{\pi^2}{a^2} (m^2 + n^2). \quad (15)$$

Перемена местами m и n оставляет собственное значение неизменным, однако изменяет геометрический характер собственных функций. В самом деле, два колебания

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{n\pi y}{a}, \\ u_2 &= \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{a} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

отличаются друг от друга. Например, u_1 имеет $m+1$ узловых линий $x = \text{const}$, u_2 имеет $n+1$ таких линий и т. д. Только в случае $m = n$ u_1 совпадает с u_2 .

За исключением основного колебания $m = n = 1$ и его гармонических ¹⁾ обертонов $m = n$, собственные значения квадратной мембраны, по крайней мере, двукратны. Более высокое вырождение наступает при определённых теоретико-числовых условиях ²⁾.

В случае двукратных собственных значений наряду с функциями (16) все функции семейства

$$v = \lambda_1 u_1 + \lambda_2 u_2 \quad (17)$$

(λ_1 и λ_2 произвольны) будут также являться собственными функциями. Более удобно эти функции записать в виде (γ произвольно):

$$v = \cos \gamma u_1 - \sin \gamma u_2. \quad (17a)$$

Насколько значительно изменяется геометрический характер собственных колебаний с изменением γ показывает рис. 21; этот рисунок приведён для случая $m = 1$, $n = 2$. Ещё более многообразные фигуры ³⁾ узловых линий получаются для больших значений m , n . Все типы колебаний, приведённые на рисунке, между собой равноправны. Случаи $\gamma = 0$, $v = u_1$ и $\gamma = \frac{\pi}{2}$, $v = -u_2$, при которых линии узлов являются прямыми и проходят параллельно сторонам квадрата, не являются в чём-либо предпочтительными по сравнению с другими типами колебаний.

Если благодаря включению возмущения состояние колебаний немного изменяется, то нет никаких оснований считать, что колебание при наличии

¹⁾ Если $m = n$, то из (7) и (15) следует, что $\omega_{n, n} = n\omega_{1, 1}$, т. е. $\omega_{n, n}$ является гармоническим обертоном основного тона $\omega_{1, 1}$; в общем же случае $\omega_{n, m}$ не является гармоническим обертоном.

²⁾ F. Rookels, Об уравнении $\Delta u + k^2 u = 0$, Teubner, 1891, стр. 79 и след. (по лекциям Ф. Клейна). Степень вырождения зависит от разложения на простые числа числа $m^2 + n^2$.

³⁾ Rookels, стр. 80.

возмущения должно непрерывно примыкать именно к состоянию колебаний с функциями u_1 или u_2 . Более того, возмущённое состояние колебаний возникает из того состояния семейства колебаний, которое более всего подходит к характеру возмущения. Пусть, например, на колеблющуюся мембрану производится лёгкий нажим пальцем [частный случай давления P в условии (7a)]. Тогда из семейства колебаний выделяются те собственные колебания, узловые линии которых проходят через место нажатия.

Аналогично обстоит дело в случае круглой мембраны, где все собственные значения (за исключением основного тона) во всяком случае двукратны вследствие азимутальной зависимости собственной функции типа $\cos \sin m\varphi$.

Возвращаясь к квантовой механике, рассмотрим уравнение (4) с функцией возмущения s , предполагая W_k α -кратным собственным значением. Подстановка (4a) приводит и в этом случае к уравнению (5) с тем, однако, различием, что теперь вместо ψ_k можно поставить любую из α собственных функций ψ_{ki} . Между тем из примера с мембраной мы знаем, что эти ψ_{ki} не играют какой-либо предпочтительной роли по сравнению с их возможными линейными комбинациями и что возмущение из α -кратного семейства (14) выделит те функции, которые могут непрерывно примкнуть к этому возмущению. Поэтому в правой части уравнения (5) мы вместо конкретных функций ψ_{ki} поставим более общие функции ψ_{kh} , оставив пока выбор коэффициентов β свободным. Каким образом необходимо выбрать эти коэффициенты? Ответ на этот вопрос даёт доказанная в пункте А теорема, которую для данного случая необходимо уточнить следующим образом. Правая часть неоднородного уравнения должна быть ортогональна ко всем решениям однородного уравнения. Это даёт нам вместо одного условия (6) α условий:

$$\int \psi_{kh}^* (s - \varepsilon p) \psi_{kj} dq = 0, \quad j = 1, 2, \dots, \alpha. \quad (18)$$

Подставляя сюда значение для ψ_{kh} , из (14) мы получим (индекс h у β можно отпустить):

$$\sum_i \beta_i \int \psi_{ki}^* (s - \varepsilon p) \psi_{kj} dq = 0. \quad (19)$$

Вслед за Шредингером введём сокращённое обозначение ¹⁾

$$\varepsilon_{ij} = \int \psi_{ki}^* s \psi_{kj} dq \quad (20)$$

¹⁾ ε_{ij} являются «матричными элементами» функции возмущения.

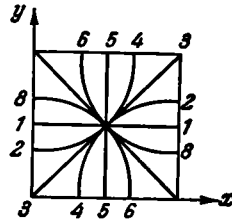


Рис. 21. Узловые линии квадратной мембраны:

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{n\pi y}{a}, \\ u_2 &= \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{a}, \end{aligned} \right\} m = 1, n = 2.$$

Номера у кривых обозначают:

Кривая	1	2	3	4	5	6	7	8
τ	0	$\frac{\pi}{8}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{3\pi}{8}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{5\pi}{8}$	$\frac{3\pi}{4}$	$\frac{7\pi}{8}$

и примем во внимание, что ψ_{kh} должны быть ортонормированными, т. е. должны удовлетворять условию

$$\int \psi_{ki}^* \psi_{kj} p dq = \delta_{ij}.$$

Тогда система уравнений (19) в развёрнутой форме будет иметь вид:

$$\left. \begin{aligned} \beta_1(\varepsilon_{11} - \varepsilon) + \beta_2 \varepsilon_{12} + \dots + \beta_n \varepsilon_{1n} &= 0, \\ \beta_1 \varepsilon_{21} + \beta_2(\varepsilon_{22} - \varepsilon) + \dots + \beta_n \varepsilon_{2n} &= 0, \\ \dots &\dots \\ \beta_1 \varepsilon_{n1} + \beta_2 \varepsilon_{n2} + \dots + \beta_n(\varepsilon_{nn} - \varepsilon) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Таким образом, мы пришли к часто встречающейся в математической физике «задаче главных осей». Возможные на основании этой системы уравнений значения ε дают величину, а значения β — направление главных осей. Путём исключения из этих уравнений β для ε получаем уравнение α -го порядка:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{11} - \varepsilon & \varepsilon_{12} & \dots & \varepsilon_{1n} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} - \varepsilon & \dots & \varepsilon_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varepsilon_{n1} & \varepsilon_{n2} & \dots & \varepsilon_{nn} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad (22)$$

которое, ввиду того что $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, имеет точно α действительных корней. Каждому этому корню на основании (21) соответствует вполне определённая система значений β и поэтому на основании (14) — вполне определённая функция ψ_{kh} семейства. Лишь в том случае, когда уравнение (22) имеет кратные корни, ψ_{kh} остаётся отчасти неопределённой, так что вырождение снимается неполностью.

Когда λ растёт, начиная с $\lambda = 0$, то из этих α собственных функций ψ_{kh} образуются функции возмущённой задачи. Функции возмущённой задачи на основании уравнения (5) могут быть вычислены, как в (10) и (11): в правую часть уравнения (5) вместо ε и ψ_k подставляем только что вычисленные ε_h и ψ_{kh} и, разделив на p , разлагаем эту правую часть, а также φ по собственным функциям ψ_{li} , где l изменяется от 1 до α , и i нумерует все собственные значения:

$$\left(\frac{s}{p} - \varepsilon_h\right) \psi_{kh} = \sum_i \sum_i A_{li} \psi_{li}, \quad (23)$$

$$\varphi_h = \sum_i \sum_i B_{li} \psi_{li}. \quad (24)$$

Так же как и в (10а), из дифференциального уравнения (5) следует, что

$$B_{li} = \frac{A_{li}}{W_k - W_i}, \quad (25)$$

причём на основании (23) для $l \neq k$ будем иметь:

$$A_{li} = \int s \psi_{li}^* \psi_{kh} dq.$$

Аналогично равенствам (13) окончательный результат гласит:

$$\left. \begin{aligned} W &= W_k + \lambda \psi_h + \dots, \\ \psi &= \psi_{kh} + \lambda \varphi_h + \dots = \psi_{kh} + \lambda \sum_i' \sum_i \frac{A_{ii} \psi_{ii}}{W_k - W_i} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Индекс h нумерует α ответвлений, на которые расщепилась вырожденная задача при включении возмущения, и соответствует α решениям алгебраического уравнения (22).

Обозначенные многоточием более высокие приближения, пропорциональные $\lambda^2, \lambda^3, \dots$, в общем случае имеют весьма не наглядный вид. В случае эффекта Штарка без большого труда будет вычислено также и второе приближение.

§ 2. ЭФФЕКТ ШТАРКА

Если вдоль оси x в отрицательном направлении действует однородное, сравнительно малое внешнее поле F , то мы должны в уравнении для задачи Кеплера [гл. II, § 1, уравнение (1)] к потенциальной энергии $V = -Ze^2/r$ добавить член eFx . Тогда, обозначая массу электрона через μ , получим уравнение

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = \frac{2\mu e}{\hbar^2} x F \psi. \quad (1)$$

Можно эту возмущённую задачу решить в полярных координатах. Однако это нерационально. Гораздо лучше воспользоваться более подходящими в данном случае параболическими координатами, о которых было сказано в гл. II, § 9. Через ξ, η, φ обозначим определённые там равенством (3) параболические координаты, через n_ξ, n_η, m — соответствующие параболические квантовые числа. Число $n = n_\xi + n_\eta + m + 1$ является главным квантовым числом. Через это число энергия невозмущённого состояния выражается в виде:

$$W = -\frac{RhZ^2}{n^2}. \quad (2)$$

Волновая функция невозмущённого состояния ввиду возможности разделения переменных в уравнении имеет вид:

$$\psi = f_\xi f_\eta e^{im\varphi} \quad [\text{равенство (II.9.5)}]. \quad (3)$$

Член возмущения, т. е. правая часть уравнения (1), ввиду того, что при переходе к параболическим координатам $x = \frac{\xi - \eta}{2}$, может быть записан в форме

$$\frac{\mu e}{\hbar^2} (\xi - \eta) F f_\xi f_\eta e^{im\varphi}.$$

Наличие этого члена не препятствует возможности разделения переменных в уравнении. Оно лишь несколько изменяет уравнение (II.9.8) для определения функций f_ξ, f_η . Теперь это уравнение будет иметь вид:

$$\frac{d^2 f}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{df}{ds} + \left(A + \frac{2B}{s} + \frac{C}{s^2} \right) f = \lambda s f, \quad \lambda = \pm \frac{\mu}{\hbar^2} e F. \quad (4)$$

Здесь s, f, A, B, C обозначают те же величины, что и в (II.9.7).

А. Поправки первого порядка к собственным значениям. Вводя новую переменную $\rho = 2\sqrt{-As}$, мы уравнение (4) [ср. (II.9.9)] приведём к виду:

$$f'' + \frac{1}{\rho} f' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{q}{\rho} - \frac{m^2}{4\rho^2} \right) f = \lambda' \rho f, \quad (5)$$

где введены следующие обозначения:

$$q = \frac{B}{\sqrt{-A}}, \quad \lambda' = \frac{\lambda}{(2\sqrt{-A})^2} = \pm \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{eF}{(2\sqrt{-A})^2}. \quad (6)$$

Величина q является собственным значением уравнения (5).

Для того чтобы иметь возможность непосредственно применить результаты предыдущего параграфа, необходимо уравнение (5) преобразовать к самосопряжённой форме, что в нашем случае осуществляется простым умножением на ρ . Тогда уравнение (5) принимает вид:

$$\frac{d}{d\rho} (\rho f') + \left(q - \frac{\rho}{4} - \frac{m^2}{4\rho} \right) f = \lambda' \rho^2 f. \quad (7)$$

Первым приближением к собственному значению q является невозмущённое собственное значение q_0 . На основании (II.9.13) оно равно

$$q_0 = \frac{m}{2} + n_i + \frac{1}{2}, \quad n_i = \begin{cases} n_\xi \\ n_\eta \end{cases}. \quad (8)$$

Это собственное значение различается для f_ξ и f_η . Как и в предыдущем параграфе, разложим q и f по степеням параметра возмущения λ' :

$$q = q_0 + \lambda' \varepsilon, \quad f = f_0 + \lambda' \varphi. \quad (9)$$

Здесь функция f_0 является решением уравнения (7) в отсутствие возмущения. На основании уравнений (9), (18), (20) из гл. II, § 9 эта функция выражается в виде:

$$f_0 = e^{-\rho/2} \rho^{m/2} \omega, \quad \omega = \frac{d^m L}{d\rho^m}, \quad \nu = m + n_i. \quad (10)$$

Подставляя (9) в (7) и пренебрегая членами порядка λ'^2 , мы для φ получим уравнение

$$\frac{d}{d\rho} (\rho \varphi') + \left(q_0 - \frac{\rho}{4} - \frac{m^2}{4\rho} \right) \varphi = (\rho^2 - \varepsilon) f_0. \quad (11)$$

На основании равенства (8) § 1 (для нашего случая $s = \rho^2$, $p = 1$, $dq = d\rho$, $\psi_k = \psi_k^* = f_0$) отсюда следует:

$$\varepsilon = \frac{K}{J}, \quad K = \int_0^\infty \rho^2 f_0^2 d\rho, \quad J = \int_0^\infty f_0^2 d\rho. \quad (12)$$

При вычислении J и K будем поступать так же, как и при вычислениях в (I.9.24). На основании равенств (10) оба интеграла J и K могут быть записаны в форме

$$\int_0^\infty e^{-\rho} G \frac{d^m L}{d\rho^m} d\rho, \quad (13)$$

где G — целая функция порядка ν для J и порядка $\nu + 2$ для K :

$$G = \rho^m \omega = a\rho^\nu + \dots, \quad (J)$$

$$G = \rho^{m+2} \omega = a\rho^{\nu+2} + b\rho^{\nu+1} + c\rho^\nu + \dots \quad (K)$$

Для того чтобы вычислить J , проинтегрируем (13) по частям m раз. При этом, как это будет показано, достаточно производить дифференцирование лишь множителя $e^{-\rho}$. В результате получаем:

$$J = \int_0^\infty e^{-\rho} (a\rho^\nu + \dots) L_\nu d\rho. \quad (14)$$

Подставив сюда представление для L_ν (II.2.1) и учитывая, что экспоненциальные множители сокращаются, будем иметь:

$$J = \int_0^\infty (a\rho^\nu + \dots) \frac{d^\nu}{d\rho^\nu} (\rho^\nu e^{-\rho}) d\rho. \quad (15)$$

Теперь можно снова интегрировать по частям. При этом все члены с показателями степени меньше чем ν дадут нуль. [Именно на этом основании в (14) достаточно было дифференцировать $e^{-\rho}$, так как члены, получающиеся в результате дифференцирования ρ^ν , всё равно при вычислении (15) дали бы нуль.] В результате получим:

$$J = (-1)^\nu \nu! a \int_0^\infty \rho^\nu e^{-\rho} d\rho = (-1)^\nu (\nu!)^2 a. \quad (16)$$

Аналогично для K найдём:

$$K = (-1)^\nu (\nu!)^2 [c + (\nu + 1)(\nu + 1 - m)b + \\ + \frac{1}{2}(\nu + 1)(\nu + 2)(\nu + 1 - m)(\nu + 2 - m)a].$$

Отсюда следует, что

$$\frac{K}{J} = \frac{c}{a} + (\nu + 1)(\nu + 1 - m) \frac{b}{a} + \\ + \frac{1}{2}(\nu + 1)(\nu + 2)(\nu + 1 - m)(\nu + 2 - m). \quad (17)$$

Для того чтобы определить величины a , b , c , необходимо вернуться к равенству (II.2.7). Из него при помощи m -кратного дифференцирования получается:

$$\frac{d^m L_\nu}{d\rho^m} = (-1)^\nu \left[\frac{\nu!}{(\nu - m)!} \rho^{\nu - m} - \frac{\nu^2 (\nu - 1)!}{(\nu - m - 1)!} \rho^{\nu - m - 1} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{\nu^2 (\nu - 1)^2 (\nu - 2)!}{(\nu - m - 2)!} \rho^{\nu - m - 2} + \dots \right].$$

Отсюда находим отношение коэффициентов $a : b : c$ для G :

$$\frac{c}{a} = \frac{1}{2} \nu(\nu - 1)(\nu - m)(\nu - m - 1), \quad \frac{b}{a} = -\nu(\nu - m). \quad (18)$$

Подставляя значение этих отношений в (17), окончательно будем иметь:

$$\frac{K}{J} = 6\nu^2 + 6\nu(1 - m) + m^2 - 3m + 2. \quad (19)$$

На основании (12) это есть поправка ϵ к собственному значению, причём необходимо делать различие между ϵ_ξ и ϵ_η в зависимости от того, идёт ли речь о собственном значении для f_ξ или для f_η . В дальнейшем нам понадобится лишь разность $\epsilon_\xi - \epsilon_\eta$, которая на основании (19) равна

$$\epsilon_\xi - \epsilon_\eta = 6(\nu_\xi - \nu_\eta)(\nu_\xi + \nu_\eta + 1 - m). \quad (20)$$

При значениях $\nu_\xi = m + n_\xi$ и $n = 1 + m + n_\xi + n_\eta$ последнее равенство принимает вид:

$$\epsilon_\xi - \epsilon_\eta = 6(n_\xi - n_\eta)n. \quad (21)$$

Б. Эффект Штарка первого порядка. На основании (9) при учёте значений q_0 из (8) и λ' из (6) возмущённые собственные значения q для обеих параболических координат будут равны

$$\left. \begin{aligned} q_\xi &= \frac{1}{2} + \frac{m}{2} + n_\xi + \frac{\mu}{h^2} \frac{eF}{(2\sqrt{-A})^3} \epsilon_\xi, \\ q_\eta &= \frac{1}{2} + \frac{m}{2} + n_\eta - \frac{\mu}{h^2} \frac{eF}{(2\sqrt{-A})^3} \epsilon_\eta. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

С другой стороны, из (6) при учёте значения B в (II.9.7) будем иметь:

$$\left. \begin{aligned} q_\xi &= \frac{1}{4\sqrt{-A}} \left(\frac{Z}{a} + \beta \right), \\ q_\eta &= \frac{1}{4\sqrt{-A}} \left(\frac{Z}{a} - \beta \right). \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Отсюда, складывая равенства (22), получим:

$$\frac{1}{2\sqrt{-A}} \frac{Z}{a} = n + \frac{\mu}{h^2} \frac{eF}{(2\sqrt{-A})^3} (\epsilon_\xi - \epsilon_\eta)$$

или, учитывая (21),

$$\frac{1}{2\sqrt{-A}} \frac{Z}{a} = n \left[1 + \frac{6\mu}{h^2} \frac{eF(n_\xi - n_\eta)}{(2\sqrt{-A})^3} \right]. \quad (23a)$$

Беря от обеих частей этого равенства квадраты обратных величин и пренебрегая высшими степенями напряжённости поля F , которая предполагается малой, мы получим:

$$-\frac{4Aa^2}{Z^2} = \frac{1}{n^2} \left[1 - \frac{3}{2} \frac{\mu}{h^2} \frac{eF(n_\xi - n_\eta)}{(\sqrt{-A})^3} \right].$$

Выразим A на основании (II.9.7) через W и заменим в поправочном члене в правой части равенства величину W в нулевом приближении согласно равенству (2):

$$-\frac{4Aa^2}{Z^2} = -\frac{2a^2\mu}{Z^2 h^2} W = \frac{1}{n^2} - \frac{3}{2} \frac{\mu h e F (n_\xi - n_\eta) n}{\left(\frac{Rh\mu}{2} \right)^{3/2} Z^3}. \quad (23b)$$

Наконец, учитывая значение величины радиуса атома водорода a и постоянной Ридберга R , получим:

$$W = -\frac{RhZ^2}{n^2} + \frac{3h^2 F}{8\pi^2 \mu e Z} (n_\xi - n_\eta) n. \quad (24)$$

Это выражение точно совпадает с формулой Шварцшильда — Эпштейна для эффекта Штарка первого порядка, которую мы обсуждали и сравнивали с экспериментом в т. I, гл. VI, § 2. Особенно следует обратить внимание там на равенство (30). Однако не только результат, полученный здесь, совпадает с результатом, полученным ранее, но и весь путь, которым мы пришли к этому результату, идёт параллельно пути, которым мы шли в т. I, гл. VI, § 2. Например, как здесь, так и там исключение постоянной разделения произведено при помощи сложения обоих значений для $q = B/\sqrt{A}$. Точно так же и вычисление A из полученной таким образом суммы проходило в обоих случаях одинаково, если отвлечься от незначительных различий в обозначениях.

Для того чтобы результаты настоящего параграфа сравнить с общими результатами предыдущего параграфа, необходимо заметить следующее: задача Кеплера является вырожденной задачей; следовательно, её рассмотрение следовало бы вести согласно с § 1, В. Вместо этого мы предпочли разделить переменные в возмущённой задаче и применить более простые методы § 1, А. Возможность этого основывается на общей теореме теории краевых задач типа Штурма — Лиувилля, которая утверждает, что собственные значения обыкновенных дифференциальных уравнений этого типа являются всегда простыми. В соответствии с этим при расчёте влияния возмущения мы исходили не из энергии W полной задачи, а из собственных значений q дифференциальных уравнений, получившихся в результате разделения переменных. Затем мы внесли в эти собственные значения поправки, обусловленные наличием возмущения. Лишь в самом конце, в равенстве (24), мы вернулись к выражению для полной энергии W рассматриваемой задачи.

В. Эффект Штарка более высокого порядка. Для того чтобы получить поправки более высокого порядка, необходимо учесть члены степени больше первой в разложении собственных значений и собственных функций по степени параметра возмущения. Полагаем:

$$q = \sum \lambda'^k q_k, \quad f = \sum \lambda'^k f_k. \quad (25)$$

Значения для q и f из (25) подставим в уравнение (7) и приравняем между собой множители, стоящие в правой и левой частях равенства при одинаковых степенях λ' . Это даст систему уравнений для рекуррентного вычисления f_k .

Первое из этих уравнений есть уравнение (11) при несколько изменённых обозначениях; «нулевое» уравнение есть дифференциальное уравнение невозмущённой задачи Кеплера. Уравнение номера k будет иметь вид:

$$\frac{d}{d\rho} (\rho f'_k) + \left(q_0 - \frac{\rho}{4} - \frac{m^2}{4\rho} \right) f_k = (\rho^2 - q_1) f_{k-1} - q_2 f_{k-2} \dots - q_k f_0.$$

Мы рассмотрим случай $k = 2$:

$$\frac{d}{d\rho} (\rho f'_2) + \left(q_0 - \frac{\rho}{4} - \frac{m^2}{4\rho} \right) f_2 = (\rho^2 - q_1) f_1 - q_2 f_0.$$

Решением соответствующего однородного уравнения, т. е. уравнения, в котором левая часть приравнена нулю, будет являться функция f_0 . Правая часть неоднородного уравнения должна быть «ортогональна» к этому решению [равенство (6) из § 1]. Это даёт равенство

$$\int \{ (\rho^2 - q_1) f_1 - q_2 f_0 \} f_0 d\rho = 0$$

и, следовательно,

$$Jq_2 = \int \rho^2 f_1 f_0 d\rho - q_1 \int f_0 f_1 d\rho. \quad (26)$$

где J есть интеграл, определённый в (12); для того чтобы вычислить правую часть, необходимо прежде всего знать f_1 . Но f_1 совпадает с функцией φ из уравнений (11). В соответствии с правилом (9) из § 1 мы должны правую часть этого уравнения, которая в принятых здесь обозначениях имеет вид $(\rho^2 - q_1)f_0$, разложить по собственным функциям невозмущённой задачи. Это даёт:

$$(\rho^2 - q_1)f_0 = \sum' A_i f_{0i}. \quad (27)$$

В левой части этого равенства f_0 , или точнее f_{0n} , означает собственную функцию нулевого приближения, из которой мы исходим, т. е. функцию с параболическим квантовым числом n_ξ или n_η ; в правой части f_{0i} означают остальные собственные функции нулевого приближения с $i \geq n$. Тогда на основании (11) из § 1 для f_1 получим следующее выражение [вместо разности собственных значений $W_k - W_i$ в (11) теперь должно стоять $q_{0n} - q_{0i}$]:

$$f_1 = \sum' \frac{A_i f_{0i}}{q_{0n} - q_{0i}}. \quad (28)$$

Отсюда видно, что второй интеграл в правой части равенства (26) равен нулю, так как f_0 , т. е. f_{0n} ортогональна ко всем f_{0i} при $i \neq n$ [член с $i = n$ в сумме (28) отсутствует]. Следовательно, подставляя (28) в (26), получаем:

$$Jq_2 = \sum' \frac{A_i}{q_{0n} - q_{0i}} \int \rho^2 f_{0n} f_{0i} d\rho. \quad (29)$$

С другой стороны, из равенства (27) по правилу нахождения коэффициентов Фурье следует:

$$\int \rho^2 f_{0n} f_{0i} d\rho - q_1 \int f_{0n} f_{0i} d\rho = A_i \int f_{0i}^2 d\rho. \quad (30)$$

Здесь вследствие ортогональности второй член в левой части равенства исчезает. Множитель при A_i , стоящий в правой части равенства, назовём J_i . Введённую ранее величину $J = \int f_{0n}^2 d\rho$ будем теперь обозначать с помощью J_n . Обозначив первый интеграл в равенстве (30) через Y_i , мы можем это равенство переписать в виде:

$$Y_i = \int \rho^2 f_{0n} f_{0i} d\rho = A_i J_i. \quad (31)$$

Подставляя это равенство в (29), будем иметь:

$$q_2 = \sum' \frac{A_i^2}{q_{0n} - q_{0i}} \frac{J_i}{J_n}. \quad (32)$$

Далее легко видеть, что $A_i = 0$ при

$$i < n - 2 \quad \text{или} \quad i > n + 2$$

и, следовательно, при дальнейших вычислениях необходимо принять во внимание лишь четыре коэффициента A :

$$A_{n-2}, A_{n-1}, A_{n+1}, A_{n+2}.$$

В самом деле, запишем интеграл (31) в форме (13) и положим $\nu = n + m$. Тогда целая функция $G = \rho^{m+2} \omega_i$ будет порядка $m + l + 2$ и этот порядок будет меньше ν , коль скоро $l < n - 2$ ¹⁾. Поэтому, как это было показано ранее, при интегрировании по частям все члены при этих условиях дадут нуль. Аналогично обстоит дело и в случае $l > n + 2$, что сразу видно при перемене местами l и n . При помощи этого метода вычисляются значения Y для $l = n \mp 2$ и $l = n \mp 1$ и отсюда на основании (31) значение $A_i = \frac{Y_i}{J_i}$. В результате получаются следующие значения для членов в сумме (32):

$$\frac{A_i^2}{q_{0n} - q_{0l}} \frac{J_i}{J_n} = \begin{cases} \frac{1}{2} \nu(\nu - 1)(\nu - m)(\nu - 1 - m), & l = n - 2, \\ 4\nu(\nu - m)(2\nu - m)^2, & l = n - 1, \\ -4(\nu + 1)(\nu + 1 - m)(2\nu + 2 - m)^2, & l = n + 1, \\ -\frac{1}{2}(\nu + 2)(\nu + 1)(\nu + 2 - m)(\nu + 1 - m), & l = n + 2. \end{cases}$$

Отсюда при помощи суммирования получается прежде всего возмущение q_2 для отдельной параболической координаты. Сумма членов q_2 для обеих координат будет равна (при этом необходимо положить для параболических координат ξ и η соответственно $\nu = n_\xi + m$ и $n_\eta + m$ и вынести за скобки главное квантовое число $n = n_\xi + n_\eta + m + 1$):

$$\sum_{\xi, \eta} q_2 = -2n \{4m^2 + 17(n_\xi + n_\eta + 1)m + \\ + 34(n_\xi^2 + n_\eta^2 - n_\xi n_\eta) + 17(n_\xi + n_\eta) + 18\}. \quad (33)$$

Теперь вернёмся к первому из равенств (25). Снова просуммируем обе его части по координатам ξ и η , ограничиваясь квадратичными относительно λ' членами. В результате получается равенство (23а), дополненное этими квадратичными членами. А именно, беря значение λ' из (6), будем иметь:

$$\frac{1}{2\sqrt{-A}} \frac{Z}{a} = n + \frac{6\mu}{\hbar^2} \frac{eF(n_\xi - n_\eta)n}{(2\sqrt{-A})^3} + \frac{\mu^2}{\hbar^4} \frac{e^2 F^2}{(2\sqrt{-A})^5} \sum q_2. \quad (34)$$

Это равенство необходимо разрешить относительно $\sqrt{-A}$, или, что то же самое, относительно W . При этом во второй член правой части равенства для W необходимо подставить его значение из первого приближения (23б), а в третий член — его значение из нулевого приближения (12). В получающемся выражении для W члены нулевого и первого порядка по F , конечно, совпадают с соответствующими членами равенства (24). К этим членам необходимо теперь лишь добавить член порядка F^2 , который представляет эффект Штарка второго порядка. Этот член при учёте (33) будет равен:

$$-\frac{\hbar^4 F^2}{16(2\pi e)^2 \mu^2 Z^4} n^4 [17n^2 - 3(n_\xi - n_\eta)^2 - 9m^2 + 19]. \quad (35)$$

Он был вычислен одновременно Вентцелем и Валлером²⁾.

В дополнении 9 т. I эффект Штарка второго порядка был рассмотрен, следуя Эпштейну, на основании старой квантовой теории. Полученные там

¹⁾ l означает одно из чисел n_ξ , n_η , относящихся к f_{0n} , так же как n означает одно из относящихся к f_{0m} чисел n_ξ , n_η .

²⁾ G. Wentzel, Zs. f. Phys. 38, 518 (1927); J. Waller, Zs. f. Phys. 38, 635 (1927).

формулы (9) и (10) отличаются от полученного здесь результата (35) внешне лишь отсутствием постоянного слагаемого 19, стоящего в квадратных скобках; но к этому добавляется более принципиальное различие, заключающееся в том, что в старой теории квантовое число m могло принимать значения 1, 2, ..., исключая нуль, в новой же теории квантовое число m может принимать значения 0, 1, 2, ... Для проверки обеих формул необходимы наблюдения при чрезвычайно сильных полях (ср. т. I, рис. 84, который позволяет качественно заметить асимметрию картины расщепления и, следовательно, установить влияние членов порядка F^2 , F^3 , ...). В количественном отношении первые указания на небольшое отклонение от формулы Эпштейна дали наблюдения Такамина и Кокубу¹⁾. В дальнейшем более точные опыты²⁾ Рауша фон Траубенберга и Гебауэра подтвердили во всех деталях формулу (35).

Конечно, преимущество новой теории по сравнению со старой заключается прежде всего в том, что она, кроме длин волн компонент линий эффекта Штарка, позволяет вычислить также и интенсивности этих компонент. Эти вычисления были проведены в достаточном приближении (собственные функции в нулевом приближении, длины волн в первом приближении) Шредингером и показали, что вычисленные значения интенсивностей для большинства компонент лучше согласуются с экспериментами, чем при вычислениях по принципу соответствия³⁾. Уточнение вычислений (собственные функции в первом приближении, длины волн во втором) указывает на наличие при сильных полях асимметрии картины расщепления интенсивностей в несколько процентов⁴⁾.

§ 3. ТЕОРИЯ ДИСПЕРСИИ

Большие успехи классической теории дисперсии основывались на представлении, что электроны в молекуле связаны квазиупругой силой и под влиянием падающей световой волны приводятся в колебательное движение. Применение этих представлений в старой квантовой теории (Ладенбург, Крамерс и Гейзенберг; см. ниже) удавалось лишь при специальных предположениях и при применении принципа соответствия. Волновая же механика без всяких специальных предположений и совершенно естественно рассматривает вопросы дисперсии как эффект возмущения со стороны световой волны.

В своём «четвёртом сообщении» Шредингер вводит в волновое уравнение зависящий от времени потенциал $V(t)$ и строит теорию дисперсии как пульсирующего эффекта Штарка. Однако удобнее, как это сделал Клейн⁵⁾, падающую световую волну описывать при помощи вектор-потенциала. Для оптических явлений оба пути ведут к одинаковым результатам.

¹⁾ Ср. A. Sommerfeld, Ann. d. Phys. 65, 36 (1921).

²⁾ К ссылкам, приведённым в т. I, гл. VI, § 3, необходимо добавить следующие: Zs. f. Phys. 56, 254 (1923), где окончательно был исследован эффект Штарка второго порядка. Ср. также M. Kiuti, там же 57, 658 (1929). Эффект Штарка третьего порядка исследован в работе R. Gebauer u. Rausch von Traubenberг, там же 62, 289 (1930) и сопоставлен с вычислениями Y. Ishida u. S. Hiyaма, Inst. phys. chem. Rev., Токуо, стр. 152 (1928). Вычисления приведены дальше в работе K. Basu, Zs. f. Phys. 93, 576 (1936).

³⁾ Согласно H. Mark и R. Wierl, Zs. f. Phys. 53, 526 (1929); 55, 156 (1929); 57, 494 (1929) можно так выбрать условия, что вычисления дадут правильное соотношение интенсивностей.

⁴⁾ T. Gustafson, Zs. f. Phys. 106, 709 (1937); N. Ryde, Naturwiss. 25, 494 (1937).

⁵⁾ O. Klein, Zs. f. Phys. 41, 407 (1927).

А. Возмущение состояния молекулы, вызванное падающей световой волной. Пусть световая волна падает вдоль оси x в положительном направлении и вектор электрической напряжённости направлен вдоль оси y (рис. 22). Тогда электродинамические потенциалы A и φ будут равны

$$A = A_y = a \cos 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{c} \right), \quad \varphi = 0. \quad (1)$$

Отсюда на основании известных равенств:

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}$$

следует:

$$\left. \begin{aligned} H_x = H_y = 0, \quad H_z = \frac{2\pi\nu}{c} a \sin 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{c} \right), \\ E_x = E_z = 0, \quad E_y = \frac{2\pi\nu}{c} a \sin 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{c} \right), \end{aligned} \right\} \quad (1a)$$

т. е. волновое поле требуемого вида.

Подставляя значение электродинамических потенциалов (1) в зависящее от времени волновое уравнение (I.6.126), получим:

$$\Delta u + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} V u = \frac{2ie}{\hbar c} a \cos 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{c} \right) \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (2)$$

Здесь задача о молекуле рассматривается как задача одного электрона. Соответственно этому m и e обозначают массу и заряд электрона; масса молекулы в уравнение не входит, так как ядра её атомов предполагаются неподвижно закреплёнными. Далее, V в этом уравнении означает потенциал внутри молекулы. Этот потенциал, конечно, может и не быть центрально симметричным. Он должен учесть не только взаимодействие рассматриваемого электрона с ядрами атомов, но и взаимодействие этого электрона с остальными электронами. Выражая косинус через экспоненциальные функции, мы вместо (2) будем иметь:

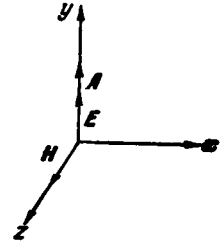


Рис. 22.

$$\Delta u + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} V u = b \frac{\partial u}{\partial y} \left\{ e^{2\pi i\nu \left(t - \frac{x}{c} \right)} + e^{-2\pi i\nu \left(t - \frac{x}{c} \right)} \right\}, \quad (3)$$

где b есть параметр возмущения (обозначенный в § 1 через λ):

$$b = \frac{ie}{\hbar c} a. \quad (4)$$

Ввиду того что этот параметр возмущения зависит указанным образом от амплитуды вектор-потенциала A , он может рассматриваться как сколь угодно малая величина.

Пусть невозмущённое состояние рассматриваемого электрона и соответственно состояние, возмущённое падающей световой волной, будет описываться функциями

$$u_k = \psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} W_k t} \quad \text{и} \quad u = u_k + b\omega + \dots \quad (5)$$

Здесь u_k удовлетворяет уравнению (3) с $b = 0$. Подставляя значение (5) для u в уравнении (3) и пренебрегая членами порядка b^2 , получим следующее

дифференциальное уравнение для w :

$$\Delta w + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial w}{\partial t} - \frac{2m}{\hbar^2} V w = \frac{\partial \psi_k}{\partial y} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} [W_k t + \hbar v] \left(t - \frac{w}{c}\right)} \right\} + e^{-\frac{i}{\hbar} [W_k t - \hbar v] \left(t - \frac{w}{c}\right)} \right\}. \quad (6)$$

Ввиду того что правая часть этого уравнения зависит от времени, положим:

$$w = w_+ e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k + \hbar v) t} + w_- e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k - \hbar v) t}. \quad (7)$$

Тогда из уравнения (6) для определения w_{\pm} получаются следующие уравнения:

$$\Delta w_{\pm} + \frac{2m}{\hbar^2} (W_k \pm \hbar v - V) w_{\pm} = \frac{\partial \psi_k}{\partial y} e^{\pm 2\pi i \frac{w}{\lambda}}, \quad (8)$$

где λ есть длина волны, соответствующая частоте ν .

Задача, стоящая перед нами, отличается от той, которую мы рассматривали в § 1, в том отношении, что теперь нам необходимо рассчитать влияние возмущения в уравнении, зависящем от времени. Несмотря на это различие, задача решается аналогично тому, как это было сделано в § 1: разлагаем правую часть уравнения (8) по полной системе собственных функций ψ_j невозмущенной задачи:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial y} e^{\pm 2\pi i \frac{w}{\lambda}} = \sum A_{jk} \psi_j, \quad (9)$$

где в соответствии с (1.12) A_{jk} равно

$$A_{jk} = \int \psi_j^* \frac{\partial \psi_k}{\partial y} e^{\pm 2\pi i \frac{w}{\lambda}} d\tau. \quad (9a)$$

У коэффициентов разложения A_{jk} наряду с индексом суммирования j добавлен ещё индекс k , относящийся к начальному состоянию с волновой функцией ψ_k . Это окажется полезным для дальнейшего. Собственные функции ψ_j удовлетворяют хорошо известному уравнению:

$$\Delta \psi_j + \frac{2m}{\hbar^2} (W_j - V) \psi_j = 0. \quad (9b)$$

Если мы искомое решение представим в виде

$$w_{\pm} = \sum B_{jk} \psi_j,$$

тогда из (8) и (9a) следует, что

$$B_{jk} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{A_{jk}}{W_k - W_j \pm \hbar v},$$

и поэтому

$$w_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{A_{jk} \psi_j}{W_k - W_j \pm \hbar v}. \quad (10)$$

На основании (4), (5), (7) и (10) возмущенное состояние может быть представлено в виде:

$$u = \psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} W_k t} + \frac{\hbar^2 b}{2m} \left\{ \sum_j \frac{A_{jk}^+ \psi_j}{W_k - W_j + \hbar v} e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k + \hbar v) t} + \right. \\ \left. + \sum_j \frac{A_{jk}^- \psi_j}{W_k - W_j - \hbar v} e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k - \hbar v) t} \right\}. \quad (11)$$

Равенство (11) показывает, что под влиянием световой волны, кроме исходного состояния k , возбуждаются также и все другие состояния j , для которых $A_{jk} \neq 0$. Если кроме дискретного спектра имеется также непрерывный спектр собственных значений, то в (11) к сумме добавляется соответствующий интеграл, как это было подчеркнуто в конце § 1, А.

Обозначение A_{jk}^{\pm} подчеркивает то обстоятельство, что на основании (9), строго говоря, значения A_{jk} в обеих суммах различаются друг от друга; если пренебречь размерами атома по сравнению с длиной волны λ , то оба значения A_{jk} могут быть положены приблизительно равными друг другу, что мы и сделаем.

Покажем, что при этом предположении величины A_{jk} находятся в тесной связи с матричными элементами y_{jk} координат [ср. (III. 2.1a)]. Прежде всего при этих предположениях равенство (9a) принимает вид

$$A_{jk} = \int \psi_j^* \frac{\partial \psi_k}{\partial y} d\tau = - \int \psi_k \frac{\partial \psi_j^*}{\partial y} d\tau,$$

где переход ко второму равенству произведён при помощи интегрирования по частям. Складывая эти равенства, получим:

$$2A_{jk} = \int \left(\frac{\partial \psi_k}{\partial y} \psi_j^* - \frac{\partial \psi_j^*}{\partial y} \psi_k \right) d\tau. \quad (12)$$

Подинтегральное выражение в правой части равенства пропорционально y -компоненте тока, соответствующего переходу $k \rightleftharpoons j$ [см. (I. 7.15)]. Это можно видеть, если в последнем равенстве опустить временной множитель и положить $A = 0$, так как функции ψ_k и ψ_j описывают невозмущённое состояние молекулы. Принимая, далее, во внимание преобразование (I. 8.16) и значение частоты перехода

$$\nu_{jk} = \frac{W_j - W_k}{h}, \quad (13)$$

найдем искомое соотношение между A_{jk} и y_{jk} :

$$A_{jk} = - \frac{2\pi m \nu_{jk}}{h} y_{jk}. \quad (14)$$

Заметим ещё, что при переходе к комплексно-сопряженным величинам будем иметь:

$$y_{jk}^* = y_{kj}, \quad (14a)$$

$$A_{jk}^* = -A_{kj}, \quad (14b)$$

причём (14b) следует из (12), а (14a) следует из (III. 2.1a). Таким образом, y_{jk} являются «эрмитовыми», A_{jk} — «антиэрмитовыми».

Учитывая равенства (13) и (14), мы равенство (11) можем переписать в виде:

$$u = \left\{ \psi_k + \frac{b}{2} \sum_j \nu_{jk} y_{jk} \left(\frac{e^{-2\pi i \nu t}}{\nu_{jk} - \nu} + \frac{e^{2\pi i \nu t}}{\nu_{jk} + \nu} \right) \psi_j \right\} e^{-\frac{i}{h} W_k t}. \quad (15)$$

Б. Частота и сила вынужденных колебаний. Дисперсионная формула. Вычислим плотность, связанную с возмущённым состоянием u , т. е. величину $u^* u$. Прежде всего из равенства (15), записанного в сокращённой форме [учитывая, что на основании (4) b является чисто мнимой

величиной], найдём:

$$\rho = u^* u = \left(\psi_k^* - \frac{b}{2} \sum^+ \right) \left(\psi_k + \frac{b}{2} \sum^- \right).$$

Очевидно, что при выполнении умножения мы можем пренебречь членом с b^2 как величиной второго порядка малости. Тогда получается:

$$\rho = \psi_k \psi_k^* + \frac{b}{2} \left\{ e^{+2\pi i \nu t} \sum^+ + e^{-2\pi i \nu t} \sum^- \right\}, \quad (16)$$

где введены обозначения:

$$\sum^\pm = \sum_j \nu_{jk} \left(\frac{y_{jk} \psi_j \psi_k^*}{\nu_{jk} \pm \nu} - \frac{y_{jk}^* \psi_j^* \psi_k}{\nu_{jk} \mp \nu} \right). \quad (16a)$$

Из (16) следует: частота вынужденных колебаний плотности совпадает с частотой падающей световой волны. Тем самым волномеханическим путём обоснована основная особенность всех дисперсионных явлений (ср. рассмотрение «скачков Смекаля» в пункте Д).

Пусть рассматриваемая молекула принадлежит газу, показатель преломления которого желательнее вычислить. Для того чтобы провести такое вычисление, необходимо прежде всего знать электрический момент молекулы. Предположим, что положительный заряд молекулы сосредоточен в начале координат. Тогда необходимо вычислить

$$M_q = e \int q \rho \, d\tau, \quad (17)$$

где q может быть любой из трёх координат.

Отсюда, учитывая (16), (14a), (III. 2.1a), будем иметь:

$$M_q = e q_{kk} + \frac{eb}{2} \sum_j \nu_{jk} \left\{ \left[\frac{y_{jk} q_{kj}}{\nu_{jk} + \nu} - \frac{y_{kj} q_{jk}}{\nu_{jk} - \nu} \right] e^{2\pi i \nu t} + \left[\frac{y_{jk} q_{kj}}{\nu_{jk} - \nu} - \frac{y_{kj} q_{jk}}{\nu_{jk} + \nu} \right] e^{-2\pi i \nu t} \right\}. \quad (18)$$

Для того чтобы перейти к величине «электрической поляризации», необходимо это выражение просуммировать по всем молекулам в единице объёма. Так как молекулы газа ориентированы беспорядочно, результирующий момент P единицы объёма будет направлен по электрическому вектору световой волны, т. е. вдоль оси y , поскольку после того, как мы пренебрегли множителем $e^{\pm 2\pi i \frac{\omega}{\lambda}}$, это направление является единственным выделенным направлением.

Следовательно, обозначая через N число молекул в единице объёма, находим:

$$P = N M_y. \quad (19)$$

Для $q = y$ равенство (18) значительно упрощается. Прежде всего ввиду (14a) будем иметь $y_{jk} y_{kj} = |y_{jk}|^2$. Кроме того, целесообразно привести это выражение к общему знаменателю и экспоненциальные функции собрать в синус. Тогда получим:

$$P = N e \left\{ y_{kk} - 2ib\nu \sum_j \frac{\nu_{jk} |y_{jk}|^2}{\nu_{jk}^2 - \nu^2} \sin 2\pi \nu t \right\}. \quad (19a)$$

Однако это выражение пока ещё образовано не вполне последовательно, так как направление поля вдоль оси y мы считали закреплённым в пространстве, в то время как собственные функции ψ_j , ψ_k вычислялись относительно осей координат, твёрдо связанных с молекулой. Следовательно, эти оси координат в зависимости от ориентировки молекулы различным образом ориентированы относительно направления поля. Поэтому необходимо принять во внимание всевозможные направления q относительно направления поля. Следовательно, в (19а) необходимо u заменить через q и усреднить по всем возможным направлениям q . Это усреднение даёт:

$$\bar{q} = 0, \quad \bar{q^2} = \frac{1}{3}(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{|r|^2}{3},$$

$$P = -\frac{2iNebv}{3} \sum_j \frac{v_{jk} |r_{jk}|^2}{v_{jk}^2 - v^2} \sin 2\pi vt.$$

Заменяем, далее, $\sin 2\pi vt$ на основании (1а) через $c|E|/2\pi va$ и на основании (4) b — через $lea/\hbar c$. Тогда получим:

$$P = \frac{Ne^2 |E|}{3\pi a} \sum_j \frac{v_{jk} |r_{jk}|^2}{v_{jk}^2 - v^2}. \quad (20)$$

Из электродинамики известно ¹⁾, что $E + P = D = \epsilon E$, и поэтому $\frac{P}{E} = \epsilon - 1 = n^2 - 1$, где через ϵ и n обозначены соответственно диэлектрическая постоянная и коэффициент преломления. Таким образом, из (20) получим:

$$n^2 - 1 = \frac{Ne^2}{3\pi \hbar} \sum_j \frac{v_{jk} |r_{jk}|^2}{v_{jk}^2 - v^2}. \quad (21)$$

Равенство примет более простой вид, если ввести круговую частоту $\omega = 2\pi v$ и соответствующие круговые частоты $\omega_{jk} = 2\pi v_{jk}$. Тогда оно запишется следующим образом:

$$n^2 - 1 = \frac{Ne^2}{m} \sum_j \frac{f_{jk}}{\omega_{jk}^2 - \omega^2}, \quad f_{jk} = \frac{2m}{3a} \omega_{jk} |r_{jk}|^2. \quad (22)$$

Это равенство в точности совпадает с классической дисперсионной формулой, как в отношении множителя перед знаком суммы, так и в отношении общегор вида «резонансного знаменателя». Однако по сравнению с классической формулой имеется следующее принципиальное различие: в классической теории вместо частот перехода ω_{jk} стоят собственные частоты ω_j . То обстоятельство, что при интегрировании уравнения (8) формализм теории возмущений автоматически замещает величины ω_k , пропорциональные W_k , величинами ω_{jk} , пропорциональными разностям $W_k - W_j$, является весьма характерным для волновой механики. Тот факт, что только частоты перехода ω_{jk} могут быть с экспериментальной точки зрения существенны для дисперсионной формулы, не нуждается в особых пояснениях, имея в виду совокупность исследований, связанных с аномальной дисперсией.

В. Обсуждение дисперсионной формулы. Силы осцилляторов и правила сумм. Формула (22) является уточнением классической

¹⁾ Если выбираются «рациональные» единицы измерения. При употреблении обычных единиц измерения необходимо было бы заменить P через $4\pi P$ и в соответствии с этим в числитель выражения (20) добавить множитель 4π .

дисперсионной формулы. Она ведёт своё начало от работы Крамерса¹⁾. Прежде в соответствии с условиями эксперимента принимали во внимание лишь основное состояние колеблющегося атома или молекулы; поэтому в дисперсионную формулу входили только те абсорбционные частоты, которые получались из этого основного состояния (у щелочных атомов это — частоты главной серии). Крамерс же рассмотрел колеблющийся атом или молекулу в произвольном возбуждённом состоянии с собственным значением W_k и обосновал по принципу соответствия представление, что в этом случае в дисперсионной формуле необходимо принять во внимание все частоты излучения, которые возможны при переходах из состояния W_k , т. е. необходимо учесть все разности $W_k - W_j$, для которых $W_j < W_k$. Волномеханическое рассмотрение подтверждает эту точку зрения: как это подчёркивалось при выводе равенства (11), решение задачи по методу теории возмущений приводит к необходимости принять во внимание *все* состояния, как с $W_j < W_k$, так и с $W_j > W_k$.

Рассмотрим более подробно числитель дисперсионной формулы. В классической электронной теории он учитывает число электронов (на атом или молекулу), которые принимают участие в соответствующем собственном колебании, или, как говорят (поскольку это число при квантовом рассмотрении не обязательно должно быть целым числом), этот числитель учитывает «силы осцилляторов». Эти «силы» в (22) обозначены, как обычно, через f . Наличие множителя $|r_{jk}|^2$ в f приводит к тому, что в дисперсионной формуле учитываются лишь те собственные значения W_j и соответствующие частоты ω_{jk} , которые могут комбинироваться с исходным собственным значением W_k . Пример: у щелочных элементов в основном состоянии S для дисперсионной формулы существуют лишь линии главной серии (SP). Частоты же, соответствующие переходам (SD), (SF), запрещённые правилами отбора для азимутального квантового числа, в дисперсионную формулу не войдут. Сами правила отбора в (II.5.2) были выведены из того факта, что вследствие ортогональности шаровых функций мы для этих переходов будем иметь $x_{jk} = y_{jk} = z_{jk} = 0$. Кроме $|r_{jk}|^2$ в f входит множитель ω_{jk} , который на основании (13) может быть как положительным, так и отрицательным. Отсюда следует: силы осцилляторов будут отрицательными для дополнительных членов Крамерса, соответствующих излучательным частотам $W_j < W_k$; эти силы будут положительными для обыкновенных членов, соответствующих абсорбционным частотам $W_j > W_k$. Для последних мы запишем $f = f_a$; для первых же, чтобы название «силы осцилляторов» более подходило, положим $f = -f_o$. Тогда дисперсионная формула (22) может быть записана в виде:

$$n^2 - 1 = \frac{e^2 N}{m} \left\{ \sum_{j > k} \frac{f_a}{\omega_{jk}^2 - \omega^2} - \sum_{j < k} \frac{f_o}{\omega_{jk}^2 - \omega^2} \right\}. \quad (23)$$

Очевидно, что под $j \geq k$ мы понимаем, что $W_j \geq W_k$.

В соответствии с формулой (23) члены, введённые в теорию Крамерсом, называются также «отрицательными дисперсионными членами», несмотря на то, что их знак тоже зависит от знака знаменателя и изменяется на обратный, когда частота падающего света ω переходит через частоту точки аномальной дисперсии, т. е. ω_{jk} .

Силы осцилляторов f удовлетворяют правилу сумм:

$$\sum_j f_{jk} = 1, \quad (24)$$

¹⁾ H. A. Kramers, Nature, май и август 1924; Kramers u. Heisenberg, Zs. Phys. 31, 684 (1925).

которое было одновременно открыто Томасом и Рейхе ¹⁾, с одной стороны, и Куном ²⁾ — с другой. Сначала оно было доказано на основании принципа соответствия. С точки зрения волновой механики это правило основывается, как и другие правила подобного рода, на полноте системы собственных функций ψ_j , по которым произведено разложение возмущения.

Мы докажем утверждение более общее, чем (24), а именно, что для любой координаты q имеет место равенство

$$\sum_j \frac{2m}{\hbar} \omega_{jk} |q_{jk}|^2 = 1. \quad (24a)$$

Пользуясь обобщённым для произвольной координаты q равенством (14), мы можем записать равенство (24a) в следующем виде:

$$-\sum 2A_{jk}q_{kj} = 1. \quad (24b)$$

Необходимо также соответствующим образом обобщить равенство (9) и (9a):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \psi_k}{\partial q} &= \sum_j A_{jk} \psi_j, \\ A_{jk} &= \int \psi_j^* \frac{\partial \psi_k}{\partial q} d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Разложение для сопряжённой функции будет иметь вид:

$$\frac{\partial \psi_k^*}{\partial q} = \sum A_{jk}^* \psi_j^*. \quad (26)$$

С другой стороны, величины q_{jk} являются полученными по правилу Фурье коэффициентами разложения в ряд функции

$$q^{\psi_k} = \sum_j q_{jk} \psi_j. \quad (27)$$

Отсюда, переходя к сопряжённым величинам, принимая во внимание (14a) и меняя обозначение индекса суммирования, получим:

$$q^{\psi_k^*} = \sum_i q_{ki} \psi_i^*. \quad (28)$$

Перемножим правые и левые части равенств (25) и (28) и проинтегрируем по координатам. Тогда получится, что

$$\int \frac{\partial \psi_k}{\partial q} q^{\psi_k^*} d\tau = \int \sum_j A_{jk} \psi_j \sum_i q_{ki} \psi_i^* d\tau = \sum A_{jk} q_{kj}. \quad (29)$$

Переход к последнему равенству произведён на основании ортонормированности функций ψ . Точно так же при перемножении равенств (26) и (27) с учётом (14a) получаются равенства:

$$\int \frac{\partial \psi_k^*}{\partial q} q^{\psi_k} d\tau = \sum A_{jk}^* q_{jk} = \sum A_{jk}^* q_{kj}. \quad (30)$$

¹⁾ W. Thomas, Naturwiss. 13, 627 (1925); F. Reiche u. W. Thomas. Zs. f. Phys. 34, 510 (1925).

²⁾ W. Kuhn, Zs. f. Phys. 33, 408 (1925).

Из равенств (14) и (14а) видно, что величина $A_{jk}y_{kj}$ является действительной величиной. То же самое справедливо для произвольной координаты q . Следовательно, мы имеем:

$$A_{jk}q_{kj} = A_{jk}^*q_{kj}^*.$$

Сложим почленно равенства (29) и (30). Справа будем иметь:

$$2 \sum A_{jk}q_{kj}. \quad (31)$$

С левой стороны получается:

$$\int q \frac{\partial}{\partial q} (\psi_k^* \psi_k) d\tau = - \int |\psi_k|^2 d\tau = -1. \quad (32)$$

Сравнивая (32) с (31), получим равенство (24б), что и требовалось доказать.

Только что доказанное правило сумм относится к случаю одного электрона. В случае системы из n электронов в равенстве (24) вместо единицы надо поставить n в соответствии с тем обстоятельством, что электрический момент такой системы будет аддитивно слагаться из электрических моментов отдельных электронов.

Сравним полученный результат с классической теорией дисперсии. В классической теории при одном колеблющемся электроне дисперсионная формула, соответствующая формуле (22), будет одночленна (не будет знака суммы и имеется лишь одно собственное колебание); в числителе в этом случае стоит число электронов $n = 1$. При волновомеханическом рассмотрении у нас получается бесконечное число членов (22), причём необходимо, конечно, принять во внимание наряду с дискретным спектром также и непрерывный спектр собственных колебаний. В случае n колеблющихся электронов классическая дисперсионная формула состоит из n членов, которые соответствуют собственным частотам колебаний различных электронов. Эти частоты могут быть различными, а могут частично и совпадать друг с другом; при волновомеханическом рассмотрении этому случаю соответствует бесконечный ряд (22) с

$$\sum f = n. \quad (33)$$

В предыдущих вычислениях мы никакой специализации потенциала V не предполагали. Для того чтобы детализировать правило сумм¹⁾, предположим, что потенциал V обладает центральной симметрией. Далее предположим, что диспергирующими системами являются атомы. Тогда для начального состояния будем иметь:

$$\psi_k = N_{lm} R_{nl} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad k = (n, l, m). \quad (34)$$

Для возмущённых состояний запишем:

$$\psi_j = N_{l'm'} R_{n'l'} P_{l'}^{m'}(\cos \vartheta) e^{im'\varphi}, \quad j = (n', l', m'). \quad (35)$$

В этих формулах N_{lm} и $N_{l'm'}$ являются нормировочными множителями угловых частей собственных функций²⁾, радиальные же части R собственных функций в (34) и (35) предполагаются нормированными на 1. На основании равенств (22),

¹⁾ E. Wigner, Phys. Zs. 32, 450 (1931); J. S. Kirkwood, там же 33, 521 (1932); H. A. Kramers, C. C. Jonker u. T. Koopman, Zs. f. Phys. 80, 178 (1933).

(23), (30) гл. I, § 9 мы имеем:

$$\frac{1}{N_{lm}^2} = \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (35a)$$

Поскольку в поле атома нет какого-либо выделенного направления, то мы можем вести расчёт в раз навсегда закреплённой системе координат.

Направим полярную ось $\theta = 0$ по направлению поляризации (ось индуцированного электрического момента) и обозначим эту ось через z (раньше y). Правило отбора числа m для матричного элемента z_{jk} будет $m' = m$. Правило отбора для l гласит: $l' \rightarrow l \pm 1$. Вследствие этого все z_{jk} и поэтому и все члены суммы (24а), которые не удовлетворяют этим правилам отбора, обратятся в нуль. Следовательно, вся сумма разобьётся на две частичные суммы с

$$l' = l + 1 \quad \text{и} \quad l' = l - 1. \quad (36)$$

В первой сумме производится суммирование по n' при фиксированных $m' = m$ и $l' = l + 1$, во второй сумме — по n' при фиксированных $m' = m$ и $l' = l - 1$; квантовые числа n, l, m k -состояния, само собой разумеется, в обеих суммах одинаковы.

Эти частичные суммы могут быть вычислены отдельно. В самом деле, функции ψ_j образуют полную ортогональную систему функций в трёх измерениях. Радиальные же части $R_{n'l'}$ этих функций ψ_j при переменном n' и фиксированном l' образуют полную ортогональную систему функций в одном измерении. Это утверждение эквивалентно утверждению, что произвольная функция $\rho(r)$ может быть разложена в ряд Фурье по $R_{n'l'}$:

$$\rho(r) = \sum_{n'} C_{n'} R_{n'l'}. \quad C_{n'} = \int \rho(r) R_{n'l'} r^2 dr; \quad (37)$$

выражение для $C_{n'}$ следует из условия ортогональности (II.2.10) для R ; нормировка, которую требуется привести в согласие с (II.2.11), в нашем случае по предположению уже проведена.

Прежде чем переходить к «правилу сумм для f », рассмотрим «правило сумм для q ». В то время как в случае «правила сумм для f » дело идёт о суммах произведений «частоты на квадрат матричного элемента» [см. (24а)], при выводе «правила сумм для q » мы рассмотрим просто сумму квадратов матричных элементов. отождествляя q -направление с выделенным в собственных функциях направлением z , образуем

$$J = \sum_j |z_{jk}|^2. \quad (38)$$

Для того чтобы вычислить эту сумму, перемножим равенство (27) и (28), положив в них $q = z$, и проинтегрируем по τ . Тогда получим:

$$\int z^2 \psi_k \psi_k^* d\tau = \int \sum_j z_{jk} \psi_j \sum_i z_{ki} \psi_i^* d\tau = \sum_j z_{jk} z_{kj} = \sum_j |z_{jk}|^2.$$

Член в левой части равенства является волномеханическим средним от z^2 в начальном состоянии k , т. е. матричный элемент от z^2 с индексом k, k , который обозначается через $(z^2)_{kk}$. Поэтому «правило сумм для q » в нерасщеплённой форме запишется в виде:

$$J = (z^2)_{kk}. \quad (39)$$

В этом равенстве правая часть на основании (34) равна

$$(z^0)_{kk} = 2\pi N_{lm}^2 \int r^2 |R_{nl}|^2 r^2 dr \int (\cos \theta P_l^m)^2 \sin \theta d\theta. \quad (40)$$

На основании равенства (15а) в дополнении 6 интеграл по углам в этом выражении равен

$$\frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \left\{ \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)} \right\}. \quad (40a)$$

Множитель, стоящий в этом выражении перед $\{ \}$, вместе с множителем $2\pi N_{lm}^2$, стоящим перед интегралом в правой части равенства (40), даёт единицу. С другой стороны, интеграл по r в (40) есть $(r^2)_{kk}$, т. е. равен волновомеханическому среднему от r^2 в начальном состоянии. Следовательно, на основании (39) и (40) имеем:

$$J = (r^2)_{kk} \left\{ \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)} \right\}. \quad (41)$$

Утверждается, что (41) даёт нам «правило сумм для q в расщеплённой форме», если только вместо (41) написать:

$$J = J_{l \rightarrow l+1} + J_{l \rightarrow l-1}, \quad (42)$$

$$J_{l \rightarrow l+1} = (r^2)_{kk} \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} \quad (42a)$$

и соответственно, заменяя l через $l-1$,

$$J_{l-1 \rightarrow l} = J_{l \rightarrow l-1} = (r^2)_{kk} \frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}. \quad (42b)$$

Первая из этих сумм соответствует переходам $k = (n, l, m) \rightarrow j = (n', l+1, m)$, вторая — переходам $k = (n, l, m) \rightarrow j = (n', l-1, m)$, все другие переходы, как мы знаем, относятся к исчезающим z_{jk} и не нуждаются в рассмотрении.

Для доказательства (42а) исходим из представления (35) для ψ_j с $j = (n', l+1, m)$. Имеем:

$$\psi_i^* = N_{l+1, -m} R_{n', l+1} P_{l+1}^m e^{-im\varphi}. \quad (43)$$

(Переход к сопряжённому выражению связан с заменой m на $-m$ в нормировочном множителе.) Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} z_{jk} &= \int \psi_j^* z \psi_k d\tau = \\ &= 2\pi N_{l+1, -m} N_{l, m} \int r R_{n, l} R_{n', l+1} r^2 dr \int \cos \theta P_l^m P_{l+1}^m \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (43a)$$

Значение интеграла по углам приведено в равенстве (15б) дополнения 6. Поэтому получаем:

$$z_{jk} = \frac{N_{l+1, -m}}{N_l} \frac{l+m+1}{2l+3} \int r R_{n, l} R_{n', l+1} r^2 dr. \quad (43b)$$

При помощи этого равенства образуем следующую сумму по n' (l фиксировано и для отличия от переменной интегрирования r аргумент функции обозначаем через \bar{r}):

$$\sum_{n'} z_{jk} R_{n', l+1}(\bar{r}) = L \sum_{n'} \int r R_{n, l} R_{n', l+1} r^2 dr R_{n', l+1}(\bar{r}). \quad (44)$$

Очевидно, что не зависящий от n' множитель L равен

$$L = \frac{N_{l+1, -m}}{N_l} \frac{l+m+1}{2l+3}. \quad (44a)$$

Сумма справа в (44) на основании (37) сразу вычисляется и даёт $\bar{r}R_{n,l}(\bar{r})$. Следовательно, записав r вместо \bar{r} , получим вместо (44)

$$\sum_n z_{jk} R_{n', l+1}(r) = Lr R_{n,l}(r). \quad (45)$$

Далее умножим последнее равенство на сопряжённое и на $r^2 dr$ и проинтегрируем обе части по r . Вследствие ортонормированности функций $R_{n', l+1}$ слева получится:

$$\sum |z_{jk}|^2 = J_{l \rightarrow l+1}. \quad (45a)$$

Справа будем иметь:

$$L^2 \int r^2 |R_{n,l}|^2 r^2 dr = L^2 (r^2)_{kk}, \quad (45b)$$

как в (41). Но на основании (44a) и (35a) мы имеем:

$$L^2 = \frac{2l+3}{2l+1} \frac{(l-m+1)!(l+m)!(l+m+1)^2}{(l+m+1)!(l-m)!(2l+3)^2} = \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}. \quad (45b)$$

Из равенств (45a, б, в) непосредственно следует равенство (42a), которое надо было доказать.

Равенство (42б) не нуждается в специальном доказательстве, так как оно, как это было указано выше, получается из (42a) при помощи замены l на $l-1$.

В равенствах (42a, б) предположено, что переходы, различающиеся значениями квантового числа m , могут быть рассмотрены обособленно. Это справедливо лишь при наличии магнитного поля. В других случаях необходимо произвести усреднение по всем m , от $-l$ до $+l$. Это даёт упрощение формул. Принимая во внимание (1.9.39), найдём:

$$\left. \begin{aligned} \bar{J}_{l \rightarrow l+1} &= \frac{1}{3} \frac{l+1}{2l+1}, \\ \bar{J}_{l \rightarrow l-1} &= \frac{1}{3} \frac{l}{2l+1} \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

в согласии с Кирквудом (см. примечание на стр. 316).

В результате усреднения у нас пропадает также выделенность направления z . В то время как (42a) и (42б) имели место лишь для матричных элементов z , соотношения (46), полученные в результате усреднения, справедливы и тогда, когда в (38) z заменено любой координатой q .

Перенесём теперь результаты этого расщепления «правила сумм для q » на правила сумм для f (24б). При этом для начала ограничимся опять случаем $q = z$. Легко показать, что при $z = r \cos \vartheta$ будем иметь:

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \cos \vartheta}$$

и, следовательно, на основании (34):

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial z} = N_{lm} \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \cos \vartheta} \right) R_{nl} P_l^m e^{im\varphi}.$$

Принимая во внимание первую частичную сумму с $l' = l + 1$ и используя (43), мы на основании (25) получим:

$$A_{jk} = 2\pi N_{l, m} N_{l+1, -m} (I + II),$$

$$I = \int \frac{dR_{nl}}{dr} R_{n', l+1} r^2 dr \int \cos \vartheta P_l^m P_{l+1}^m \sin \vartheta d\vartheta,$$

$$II = \int \frac{1}{r} R_{nl} R_{n', l+1} r^2 dr \int \sin^2 \vartheta \frac{\partial P_l^m}{\partial \cos \vartheta} P_{l+1}^m \sin \vartheta d\vartheta.$$

Значение интегралов по углам в I и II вычислены в (156) и (15в) дополнения 6. Воспользовавшись обозначением (44а), запишем:

$$A_{jk} = L \left(\int \frac{dR_{nl}}{dr} R_{n', l+1} r^2 dr - l \int \frac{R_{nl}}{r} R_{n', l+1} r^2 dr \right).$$

Так же как и в (45), принимая во внимание (37), образуем сумму

$$\sum_{n'} A_{jk} R_{n', l+1} = L \left(\frac{dR_{nl}}{dr} - \frac{l}{r} R_{nl} \right).$$

Последнее равенство умножаем на величины, сопряжённые величинам в (45), в произведение интегрируем по r . Слева получим:

$$\sum A_{jk} z_{kj}. \quad (47)$$

Справа будем иметь:

$$L^2 \left(\int \frac{dR_{nl}}{dr} R_{nl}^* r^3 dr - l \int |R_{nl}|^2 r^2 dr \right). \quad (47а)$$

Последний интеграл равен единице вследствие нормировки R ; первый интеграл, в силу того, что он действителен, преобразуется к виду:

$$\frac{1}{2} \int \frac{d}{dr} |R_{nl}|^2 r^3 dr = -\frac{3}{2} \int |R_{nl}|^2 r^2 dr = -\frac{3}{2}.$$

Поэтому (47а) переходит в

$$-\frac{1}{2} L^2 (2l + 3) = -\frac{1}{2} \frac{(l+1)^2 - m^2}{2l+1}, \quad (47б)$$

причём при переходе к последнему равенству учтено (45в). Сравнение (47) с (47б) даёт «расщеплённое правило сумм для f » в следующей форме:

$$-\sum_j A_{jk} z_{kj} = \frac{(l+1)^2 - m^2}{2l+1}. \quad (47в)$$

Вторую сумму (36) нет необходимости вычислять заново, так как она сразу получается из (47в) и «нерасщеплённого» правила сумм (24б). Мы будем иметь:

$$-\sum_j A_{jk} z_{kj} = 1 - \frac{(l+1)^2 - m^2}{2l+1} = \frac{m^2 - l^2}{2l+1}. \quad (47г)$$

Усредняя по m , получим ещё, так же как и в случае правила сумм для q , следующие f -суммы, не связанные с наличием магнитного поля:

$$\frac{l+1}{3} \frac{2'+3}{2l+1} \quad \text{и соответственно} \quad -\frac{l}{3} \frac{2'-1}{2l+1}, \quad (47д)$$

которые справедливы для произвольной координаты q . Отрицательный знак в последней формуле отвечает отрицательному дисперсионному члену (стр. 314). Значение частичных сумм (47д) согласуется с результатами Вигнера (см. примечание на стр. 367).

Г. Релеевское и комбинационное рассеяние. Возвратимся снова к точке зрения пункта А и более внимательно рассмотрим электрический момент молекулы, на которую падает световая волна. При этом будем делать различие между моментами состояний и моментами переходов. Моменты состояний в случае невозмущённых молекул не зависят от времени, т. е. состояния не способны давать излучения; лишь переходы дают излучение, частота которого определяется условием Бора. В возмущённых состояниях молекул также происходит излучение, излучение имеет ту же частоту, что и частота падающего света, как это видно из равенства (18). Это излучение есть *нормальное*, или *релеевское*, рассеяние. В противоположность этому при переходах излучается изменённая частота. Мы в этом случае говорим о *комбинационном* рассеянии. Дело идёт о некогерентном рассеянии, так как вследствие различия частот падающего и рассеянного излучения между ними не может существовать никакого фазового соотношения.

Пусть u_k и u_l будут два невозмущённых состояния системы (атома или молекулы); соответствующие возмущённые падающей световой волной состояния пусть будут u и v . Функция u дана равенством (11). Функция v получается из (11) заменой k на l . Образует смешанную плотность u^*v . Так же как и в (16), пренебрегая членами второго порядка малости относительно параметра возмущения b , будем иметь:

$$u^*v = \left\{ \psi_k^* \psi_l + \frac{b}{2} \left(e^{2\pi i \nu t} \sum^+ + e^{-2\pi i \nu t} \sum^- \right) \right\} e^{-2\pi i \nu_{lk} t}, \quad (48)$$

$$\sum^\pm = \sum_j \left(\nu_{jl} \frac{y_{jl} \psi_j^* \psi_k^*}{\nu_{jl} \pm \nu} - \nu_{jk} \frac{y_{jk} \psi_j^* \psi_l}{\nu_{jk} \mp \nu} \right). \quad (48a)$$

Момент, соответствующий этой плотности, будет равен

$$M_{kl} = e \int qu^*v d\tau = eq_{kl} e^{-2\pi i \nu_{lk} t} + \frac{eb}{2} \left\{ Q_{kl}^+ e^{2\pi i (\nu - \nu_{lk}) t} + Q_{kl}^- e^{-2\pi i (\nu + \nu_{lk}) t} \right\}, \quad (49)$$

$$Q_{kl}^\pm = \sum_j \left(\nu_{jl} \frac{y_{jl} q_{kj}}{\nu_{jl} \pm \nu} - \nu_{jk} \frac{y_{jk} q_{jl}}{\nu_{jk} \mp \nu} \right). \quad (49a)$$

Из (49), (49a) могут быть получены частоты, интенсивности и правила отбора для некогерентного рассеянного излучения.

1. *Частоты рассеянного излучения.* Для того чтобы уточнить наши предложения, примем, что u_k есть основное состояние и u_l — возбуждённое состояние невозмущённой молекулы. Тогда то же самое справедливо и для возмущённых состояний u и v . Величина ν_{lk} положительна. Из (49) видно, что, кроме ν_{lk} — частоты спонтанного перехода $l \rightarrow k$, которая нас здесь не интересует, появляются ещё две частоты:

$$\nu - \nu_{lk} \quad \text{и} \quad \nu + \nu_{lk}. \quad (50)$$

(Здесь написано именно $\nu - \nu_{lk}$, а не $\nu_{lk} - \nu$, так как во всех практических важных случаях $\nu > \nu_{lk}$.) Возможность некогерентного рассеяния с этими частотами была установлена ещё до волновой механики Смекалем¹⁾ на основании рисунков и формул 23а и 23б.

¹⁾ A. Smekal, Naturwiss. 11, 873 (1923).

Экспериментально доказать наличие этих «скачков Смекаля» удалось, как известно (без предварительного знания работы Смекаля), Раману¹⁾ и Кришнану. При рассеянии света в чистых жидкостях и газах²⁾ они, кроме обычного рассеянного света с неизменной частотой, наблюдали также рассеянное излучение более низких частот, чем частота падающего света в соответствии с рис. 23а. В отдельных случаях они наблюдали также рассеяние и с большей частотой в соответствии с рис. 23б. Заведомо ясно, что процесс, представленный на рис. 23б, будет слабее, чем процесс, представленный на рис. 23а, так как он предполагает наличие более возбуждённого атома по

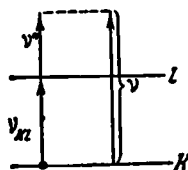


Рис. 23а. Атом находится в основном состоянии k . Падающая волна частоты ν вызывает одновременно возбуждение атома (переход $k \rightarrow l$) и излучение с меньшей частотой:
 $\nu^* = \nu - \nu_{lk} < \nu$;
 при этом $h\nu_{lk} = W_l - W_k$

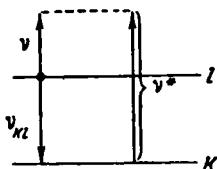


Рис. 23б. Атом находится в возбуждённом состоянии l . Под воздействием падающей волны частоты ν атом переходит в энергетически более низкое состояние k и изучает большую частоту:
 $\nu^* = \nu + \nu_{lk} > \nu$;
 при этом опять $h\nu_{lk} = W_l - W_k$

сравнению с процессом рис. 23а. Переходы типа рис. 23а мы будем называть *стоксовскими*, типа рис. 23б — *антискотковскими*.

Комбинационное рассеяние является оптическим аналогом эффекта Комптона, как это видно из его рассмотрения в гл. VIII. Уже отсюда видно фундаментальное значение этого эффекта. Эта аналогия далее была освещена в обширной литературе, в которой по частотам ν_{lk} изучались инфракрасные частоты колебаний исследуемых молекул (например, бензола, толуола, воды).

2. *Правила отбора.* Величинами, определяющими интенсивность рассеянного света, являются Q_{ki}^{\pm} в (49а). Здесь u и q являются соответственно направлениями поляризации падающей световой волны и наблюдаемой рассеянной волны.

Прежде всего рассмотрим числители выражения для Q_{ki}^{\pm} . В этих числителях стоят произведения *двух* матричных элементов. Следовательно, существует определённая зависимость между интенсивностями при комбинационном рассеянии и интенсивностями излучения при обычных переходах. В последнем случае интенсивности определяются посредством *одного* матричного элемента. Эта связь приводит нас к правилам отбора для комбинационного рассеяния.

Первоначально существовало мнение, что частоты ν_{lk} совпадают с частотами собственных колебаний молекул, которые лежат в инфракрасной части спектра и потому трудно доступны для непосредственного наблюдения. Комбинационное рассеяние весьма удобно отражает эти колебания на шкалу видимой части спектра. Однако такому мнению, строго говоря, противоречат правила отбора; если колебания ν_{lk} возможны как дипольные колебания абсорбции или излучения, то они должны быть запрещены как сдвиги частот при комбинационном рассеянии, и наоборот, или, выражаясь в другой форме: строго говоря, величины q_{ki} и Q_{ki} не могут быть одновременно отличными от нуля.

Для того чтобы это установить, будем исходить из простейшей схемы правил отбора, которые имеют место для гармонического осциллятора. Эти

¹⁾ Raman, Indian Journ. of Phys. 2, март 1928; см. также Nature 121, 501 и 122, 12 (1928).

²⁾ На кристаллах это явление независимо от индийских исследований было открыто Ландсбергом и Мандельштамом, Naturwiss. 16, 557 (1928).

правила отбора допускают лишь переходы с изменением квантового числа на ± 1 . Для того чтобы q_{kj} было отлично от нуля, должно быть

$$j = \begin{cases} k + 1, \\ k - 1. \end{cases} \quad (51)$$

Чтобы одновременно и u_l было отлично от нуля, необходимо, чтобы имело место равенство

$$l = \begin{cases} k + 2, \\ k, \\ k - 2. \end{cases} \quad (51a)$$

Но для этих трёх значений l величина q_{kl} обращается в нуль на основании правил отбора для осциллятора. Это и означает, что колебания ν_{jk} , разрешённые как сдвиг при комбинационном рассеянии, запрещены как частоты линий излучения или абсорбции. Если же, например, наоборот, ν_{jk} разрешена как линия абсорбции, следовательно, $l = k \pm 1$, то не существует такого третьего уровня j , который мог бы одновременно комбинироваться с k и l ; следовательно, ν_{jk} не может стать в этом случае частотой сдвига при комбинационном рассеянии.

Если правила отбора не являются абсолютно строгими, как это имеет место, например, в случае ангармонического осциллятора, и возможны спонтанные переходы с изменением квантового числа на ± 2 , хотя и с меньшей вероятностью, то и альтернатива — либо сдвиг при комбинационном рассеянии, либо абсорбция — не является более категорической. Это обстоятельство и сделало возможным для Рамана и Кришнана в их первых исследованиях установить общую связь между величиной сдвигов при комбинационном рассеянии и инфракрасной абсорбцией (бензол, толуол и т. д.). Однако правила отбора попрежнему дают себя знать в виде соотношения интенсивностей: сильные линии абсорбции соответствуют слабым линиям комбинационного рассеяния, и наоборот.

Общее правило для возможности осуществления эффекта со сдвигом частот ν_{jk} гласит: должны существовать один или несколько уровней j , которые были бы способны комбинировать с k и l .

Комбинационное рассеяние для вращательных частот газов H_2 , N_2 , O_2 исследовано в классических работах Разетти¹⁾. Последовательные линии отстоят друг от друга на расстоянии в два раза больше, чем расстояние между следующими друг за другом линиями полосатого спектра вращательных колебаний, в согласии с равенством (51a). Зная положение этих линий относительно возбуждающей линии (Hg 2537), можно сделать важные выводы о спине ядра соответствующего атома (u_N спин ядра равен единице).

Мы не можем здесь ближе касаться вопроса о количественных оценках интенсивностей и вопроса о поляризации. Это завело бы нас слишком далеко в вопросы симметрии молекулярных структур. Поэтому укажем лишь на работу Плачека²⁾. Для общей ориентировки в проблемах и результатах исследований эффекта комбинационного рассеяния полезна монография Кольрауша³⁾.

¹⁾ F. Rasetti, Phys. Rev. 34, 367 (1929); Nat. Acad. Amer. 15, 515 (1929); Zs. f. Phys. 61, 398 (1930); Nature; ноябрь 23, 1929.

²⁾ G. Placzek, Handbuch der Radiologie, 2-е изд., т. VI, 2, Leipzig, 1934.

³⁾ K. W. F. Kohrausch, der Smekal-Raman-Effekt, Berlin, Jul. Springer, т. I, 1931; т. II, 1938.

§ 4. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДИРАКА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ

В предыдущем изложении мы рассматривали возмущение, которое существует постоянно. Теперь изучим процесс появления возмущения. Соответствующий метод разработан Дираком ¹⁾. По причинам, которые сейчас будут выяснены, этот метод называется также *методом вариации постоянных*.

Пусть $t = 0$ будет тем моментом времени, когда появляется возмущение. Далее, для $t < 0$ пусть справедливо волновое уравнение:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H\right) u = 0, \quad (1)$$

решения которого составляют полную систему собственных ортонормированных функций u_k, \dots с собственными значениями W_k, \dots :

$$u_k = \psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} W_k t}. \quad (2)$$

Невозмущенное состояние системы описывается при помощи этих функций. Для $t > 0$ волновое уравнение гласит:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H + H_s\right) u = 0. \quad (3)$$

Пусть оператор возмущения H_s имеет вид:

$$H_s = V_s - \frac{e\hbar}{icm} (A_s \text{ grad}), \quad (3a)$$

где V_s есть возмущающий потенциал электрического происхождения, а A_s есть вектор-потенциал магнитного происхождения; в отношении множителя при $(A_s \text{ grad})$ сказано на стр. 42. В общем случае V_s и A_s зависят от времени. Собственные функции стационарного состояния (2) не являются решениями этого уравнения. Однако, ввиду того что функции u_k составляют полную систему функций, мы можем искомое решение уравнения (3) представить в виде:

$$u = \sum a_k u_k + \dots, \quad (4)$$

где многоточием обозначен интеграл по непрерывному спектру собственных значений. Представим себе, что мы это разложение произвели для различных моментов времени. Тогда и коэффициенты a_k в зависимости от значения t будут различными. Следовательно, a_k являются функциями времени, но «медленно меняющимися функциями» в сравнении с быстро изменяющимися экспоненциальными множителями, содержащимися в u_k . Зависимость a_k от времени определяется из дифференциального уравнения (3). Подстановка (4) в (3) даёт:

$$\frac{\hbar}{i} \left(\sum \frac{da_k}{dt} u_k + \sum a_k \frac{\partial u_k}{\partial t} \right) + \sum a_k H u_k + \sum a_k H_s u_k = 0.$$

Ввиду (1) два средних члена взаимно уничтожаются. Поэтому получим:

$$\frac{\hbar}{i} \sum \frac{da_k}{dt} u_k + \sum a_k H_s u_k = 0. \quad (5)$$

¹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 112, 661 (1926).

Умножаем это равенство на u_j^* , понимая под j некоторый фиксированный индекс, и интегрируем по $d\tau$. В результате будем иметь:

$$-\frac{\hbar da_j}{i dt} = \sum_k a_k A_{jk}, \quad A_{jk} = \int u_j^* H_\nu u_k d\tau. \quad (6)$$

Это уравнение определяет изменение a со временем в зависимости от значений самих a ; значение же a определяется конкретными условиями задачи. Следовательно, это уравнение учитывает ту «вариацию постоянных» в (4), которую требует уравнение (3).

Для того чтобы разложение (4) было пригодно с точки зрения волновой механики, необходимо, чтобы u было нормировано на 1. Следовательно, должно иметь место равенство

$$\int u^* u d\tau = \int \sum_{k,j} a_k^* a_j u_k^* u_j d\tau = 1,$$

или, учитывая ортогональность и нормировку u_k, u_j ,

$$\sum |a_j|^2 = 1. \quad (7)$$

Покажем, что если это условие выполнено для какого-то одного момента времени, например $t=0$, то оно будет выполнено и для всех других моментов времени. Для доказательства умножим уравнение (6) на a_j^* и просуммируем по j . С другой стороны, уравнение, сопряжённое к уравнению (6),

$$+\frac{\hbar da_j^*}{i dt} = \sum_k a_k^* A_{jk}^* \quad (7a)$$

умножим на a_j и также просуммируем по j . Тогда получим соответственно равенства:

$$-\frac{\hbar}{i} \sum_j a_j^* \frac{da_j}{dt} = \sum_{k,j} a_k a_j^* A_{jk}, \quad (8)$$

$$+\frac{\hbar}{i} \sum_j a_j \frac{da_j^*}{dt} = \sum_{k,j} a_k^* a_j A_{jk}^* = \sum_{k,j} a_k a_j^* A_{kj}^*. \quad (8a)$$

В равенстве (8a) последняя сумма равна предыдущей, потому что получается из неё простым изменением обозначений индексов суммирования $k \rightleftharpoons j$. Вычитая (8) из (8a), получим:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \sum_j a_j a_j^* = \sum_{k,j} a_k a_j^* (A_{kj}^* - A_{jk}). \quad (9)$$

Отсюда видно, что правая часть этого равенства обращается в нуль, если матрица A_{kj} является эрмитовской¹⁾; но тогда равенство (9) означает, что $\sum |a_j|^2$ не зависит от времени и условие (7) сохраняется с течением времени, коль скоро оно было выполнено для некоторого момента времени.

¹⁾ В гл. III, § 4 и 5 было показано, что все имеющие физический смысл операторы имеют эрмитовские матрицы. В рассматриваемом случае непосредственно видно, что оператор, сопряжённый к оператору возмущения H_ν , равен H_ν^* . Но отсюда следует (см. стр. 163), что матрица A_{jk} , принадлежащая оператору H_ν , является эрмитовской.

Теперь предположим, что при значениях времени $t \leq 0$ система находилась в состоянии u_k . Тогда для $t = 0$ постоянные a имеют следующие значения:

$$a_k = 1, \quad a_j = 0 \quad \text{для } j \neq k. \quad (10)$$

Отсюда на основании (6) для достаточно малых t имеют место равенства:

$$i\hbar \frac{da_j}{dt} = A_{jk},$$

$$i\hbar a_j = \int_0^t A_{jk} dt = \int_0^t d\tau \int u_j^* H_J u_k dt. \quad (11)$$

Все коэффициенты a_j имеют тот же порядок, что и H_s . Поэтому для коэффициента $a_k = 1$ мы можем пренебречь той частью его изменения, которая вносится возмущением.

В качестве примера возьмём за оператор возмущения тот оператор H_s , который соответствует падающей волне в теории дисперсии. Там мы имели [пользуясь обозначениями и допущениями (3.1)]:

$$A = A_y = a \cos 2\pi \left(vt - \frac{x}{\lambda} \right), \quad V_s = 0. \quad (12)$$

Поэтому на основании (3а) запишем:

$$H_s u_k = \frac{ie\hbar a}{2cm} (e^{2\pi i(vt - x/\lambda)} + e^{-2\pi i(vt - x/\lambda)}) \frac{\partial u_k}{\partial y}. \quad (12a)$$

Отсюда на основании (11), принимая во внимание (2), получим:

$$\dot{a}_j = \frac{ea}{2cm} \int d\tau \psi_j^* \frac{\partial \psi_k}{\partial y} \left[e^{+2\pi i \frac{\omega}{\lambda} \tau} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (W_j - W_k - \hbar\nu) t} dt + \right. \\ \left. + e^{-2\pi i \frac{\omega}{\lambda} \tau} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (W - W_k + \hbar\nu) t} dt \right]. \quad (13)$$

Произведя интегрирование по t и пользуясь равенством (3.9а), в котором величины отличаются от употребляемых в настоящем параграфе величин A_{jk} лишь постоянным множителем, вместо (13) будем иметь:

$$a_j = \frac{ie\hbar a}{2cm} \left[A_{jk}^+ \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (W_j - W_k - \hbar\nu) t} - 1}{W_k - W_j + \hbar\nu} + A_{jk}^- \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (W_j - W_k + \hbar\nu) t} - 1}{W_k - W_j - \hbar\nu} \right]. \quad (14)$$

Наконец, согласно с равенством (4) мы должны образовать сумму по всем $a_j u_j$. При этом выделим состояние k с $a_k = 1$ и выразим функции u через ψ согласно с равенством (2). Умножая затем временной множитель функции u_j на величину, заключённую в квадратные скобки, и учитывая значение b из (3.4), найдём:

$$u = \psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} W_k t} + \frac{\hbar^2 b}{2m} \left\{ \sum_j \frac{A_{jk}^+ \psi_j}{W_k - W_j + \hbar\nu} (e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k + \hbar\nu) t} - e^{-\frac{i}{\hbar} W_j t}) + \right. \\ \left. + \sum_j \frac{A_{jk}^- \psi_j}{W_k - W_j - \hbar\nu} (e^{-\frac{i}{\hbar} (W_k - \hbar\nu) t} - e^{-\frac{i}{\hbar} W_j t}) \right\}. \quad (15)$$

Полученное выражение точно совпадает с (3.11) за исключением характера зависимости от времени. Однако и зависимость от времени была бы совершенно одинаковая, если бы мы опустили члены с $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_j t\right)$. С точки зрения нестационарной задачи эти члены учитывают то обстоятельство, что в момент времени $t=0$ возмущение должно полностью отсутствовать. Следовательно, члены, заключённые в круглые скобки, показывают, каким образом возмущение возрастает от своего начального значения, равного нулю.

Если теперь, исходя из равенства (15), образовать величину электрического момента M состояния u и перейти к поляризации P , как на стр. 312, то получим выражение, аналогичное (3.19а), но отличающееся от него наличием членов с временной зависимостью. Эти члены соответствуют собственным колебаниям диспергирующих атомов, возбуждаемых при включении возмущения. Однако ввиду того, что эти колебания имеют различные продолжительности, они вследствие интерференции большею частью уничтожаются. Кроме того, фаза этих колебаний зависит от фазы включаемого возмущения (например, зависит от того, описывается ли возмущение при помощи $\sin 2\pi\nu t$ или $\cos 2\pi\nu t$). Поэтому единственно существенной, определяемой падающей волной частью поляризации P остаётся величина, даваемая выражением (3.19а), исходя из которой в предыдущем параграфе и была развита теория дисперсии.

Для дальнейшего применения рассмотрим ещё отдельно возмущение в непрерывном спектре. Запишем равенство (4) в следующем виде:

$$u = \dots + \int a_{\omega} u_{\omega} d\omega, \quad (16)$$

где $d\omega$ означает энергетический интервал в непрерывном спектре и, следовательно, a_{ω} является амплитудой, соответствующим образом нормированной собственной функции u_{ω} непрерывного спектра; многоточием теперь обозначены собственные функции дискретного спектра.

Исходя из $a_k = 1$, $a_j = 0$, $a_{\omega} = 0$, аналогично с (11) получим для изменения a_{ω} следующее выражение:

$$i\hbar a_{\omega} = \int_0^t A_{\omega k} dt = \int d\tau \int u_{\omega}^* H_{\omega} u_k dt. \quad (17)$$

Условие сохранения нормировки a при наличии также и непрерывного спектра получается обобщением равенства (7) в следующем виде:

$$\sum_j |a_j|^2 + \int_0^{\infty} |a_{\omega}|^2 d\omega = 1. \quad (18)$$

Если в качестве возмущения взять то же возмущение (плоскую волну), что и в (12), (12а), то за счёт непрерывного спектра получим некоторый добавок, а именно, правую часть равенства (15) надо дополнить членами:

$$u = \dots + \frac{\hbar^2 b}{2m} \left\{ \int \frac{A_{\omega k}^+ \psi_{\omega} d\omega}{W_k - \omega + \hbar\nu} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(W_k + \hbar\nu)t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t} \right) + \right. \\ \left. + \int \frac{A_{\omega k}^- \psi_{\omega} d\omega}{W_k - \omega - \hbar\nu} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(W_k - \hbar\nu)t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t} \right) \right\}. \quad (19)$$

§ 5. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ О ЗАДАЧАХ СТОЛКНОВЕНИЯ. ПРИБЛИЖЕНИЕ БОРНА¹⁾

Пусть свободная заряженная частица (масса M , например α -частица; в частном случае электрона $M = m$) сталкивается с атомом (система из ν электронов + ядро, в частном случае атома водорода $\nu = 1$ или в случае голого ядра $\nu = 0$). В нулевом приближении свободная, падающая на атом частица, описывается плоской волной

$$\left. \begin{aligned} e^{i(kr)}, \quad \frac{k}{k} \text{ — направление движения частицы,} \\ \frac{k^2 \hbar^2}{2M} = T \text{ — кинетическая энергия.} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

В нулевом приближении атом, на который падает частица, описывается его невозмущённой собственной функцией

$$\varphi_0 = \varphi_0(q) \quad (2)$$

(причём W_0 равно одному из собственных значений из ряда W_1, W_2, \dots). Функция φ_0 удовлетворяет волновому уравнению для изолированного атома:

$$(H - W_0)\varphi_0 = 0. \quad (2a)$$

Тогда функция нулевого приближения для системы частица + атом будет равна

$$\psi_0 = e^{i(kr)}\varphi_0(q). \quad (3)$$

Обозначим энергию взаимодействия между обеими частями рассматриваемой системы через $V(r, q)$; величина этой энергии предполагается малой величиной первого порядка. Волновое уравнение для сложной системы ($\nu + 1$ частиц, если мы отвлечёмся от ядра) будет уравнением в конфигурационном пространстве $3(\nu + 1)$ измерений. Это уравнение имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + H + V(r, q) - W \right\} \psi = 0. \quad (4)$$

Оператор Δ действует исключительно на координаты падающей частицы. Через W обозначена полная энергия сложной системы; энергия должна складываться из T и W_0 :

$$W = T + W_0. \quad (4a)$$

Аналитически последнее утверждение следует из (4), так как при $r \rightarrow \infty$ $V(r, q) \rightarrow 0$ и $\psi \rightarrow \psi_0$.

Решение (4) представим в форме

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2 + \dots \quad (5)$$

В ряду, стоящем справа, каждый следующий член должен быть меньше предыдущего и относительно него имеет порядок малости, равный энергии возмущения V . Функция ψ_0 на основании (2a) и (3) удовлетворяет следующему волновому уравнению:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + H - T - W_0 \right\} \psi_0 = 0. \quad (6)$$

¹⁾ M. Born, Göttinger Nachr. 1926, стр. 146; Zs. f. Phys. 37, 863 (1926); 38, 803 (1926); W. Eisasser, там же 45, 522 (1926).

Вследствие этого при подстановке (5) в (4) все члены с ψ_0 выпадают, за исключением члена $V(r, q)\psi_0$. Последний берётся в качестве члена первого порядка малости в дифференциальном уравнении для ψ_1 . Поэтому это уравнение будет неоднородным и имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + H - T - W_0 \right\} \psi_1 = -V(r, q)\psi_0. \quad (7)$$

В общем виде для ψ_n справедливы следующие неоднородные уравнения, имеющие вид рекуррентных уравнений:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + H - T - W_0 \right\} \psi_n = -V(r, q)\psi_{n-1}. \quad (7a)$$

Функция, представленная рядом (5) с функциями, удовлетворяющими выписанным уравнениям, при условии сходимости этого ряда удовлетворяет уравнению (4) и имеет собственное значение W , определяемое равенством (4a).

Для того чтобы проинтегрировать уравнения (7), (7a), представим, следуя Борну, функцию ψ_n в виде разложения по атомарным собственным функциям φ_α с коэффициентами разложения f_α , которые будут зависеть только от координат r частицы:

$$\psi_n = \sum_{\alpha} f_{\alpha, n}(r) \varphi_{\alpha}(q). \quad (8)$$

Функция φ_{α} аналогично (2a) удовлетворяет следующему волновому уравнению:

$$(H - W_{\alpha}) \varphi_{\alpha} = 0. \quad (8a)$$

Уравнения для определения величин f мы получим, подставив (8) в (7a) и используя (8a); тогда имеем:

$$\sum_{\alpha} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + W_{\alpha} - T - W_0 \right\} f_{\alpha n} \varphi_{\alpha} = -V(r, q)\psi_{n-1}. \quad (9)$$

Эти уравнения, полученные по методу Борна, отличаются от уравнений, полученных по методу Шредингера в § 1 [равенство (10) и далее], существенно лишь в том отношении, что здесь выделены координаты $(\nu+1)$ -й частицы от координат остальных ν частиц и полная энергия W [непрерывный спектр относительно $(\nu+1)$ -й частицы!] остаётся независимой от функции возмущения V ; невозмущённые же собственные функции в обоих случаях предполагаются известными.

Равенства (9) образуют бесконечную линейную систему дифференциальных уравнений относительно бесконечно большого числа неизвестных $f_{\alpha n}$. Для того чтобы получить уравнение для какой-либо одной неизвестной, необходимо обе части уравнения умножить на ψ_{β}^* и проинтегрировать по конфигурационному пространству атома. Тогда, вводя обозначение

$$k_{\alpha\beta}^2 = \frac{2M}{\hbar^2} (-W_{\alpha} + T + W_0), \quad (9a)$$

мы для определения $f_{\beta n}$ получим следующее уравнение:

$$(\Delta + k_{\beta n}^2) f_{\beta n} = \frac{2M}{\hbar^2} \int V(r, q) \psi_{n-1} \varphi_{\beta}^* dq. \quad (10)$$

Правая часть этого уравнения является известной функцией от r , не зависящей от q после проведения интегрирования. Следовательно, в (10) мы

имеем дело опять с неоднородным дифференциальным уравнением в частных производных, однако весьма простого типа.

Для интегрирования этого уравнения мы можем воспользоваться общим методом *функции Грина*. Функция Грина дифференциального уравнения $\Delta f + k^2 f = 0$ для неограниченной области, удовлетворяющая на бесконечности «условию излучения»¹⁾, равна

$$G(r', r) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|r'-r|}}{|r'-r|}. \quad (11)$$

Функция G удовлетворяет однородному уравнению $\Delta G + k^2 G = 0$ по обоим аргументам r и r' везде, за исключением точек $r = r'$, в которых она имеет простой полюс²⁾. Неоднородное уравнение $\Delta f + k^2 f = \Phi$ интегрируется при помощи теоремы Грина. Известным способом находим:

$$f(r) = - \int \Phi(r') G(r', r) dr'. \quad (11a)$$

Учитывая, что

$$|r - r'| = r \left[1 - \frac{(rr')}{r^2} + \dots \right] = r - \left(\frac{r}{r'} r' \right) + \dots, \quad (11b)$$

мы для больших значений r получим [в знаменателе (11) величина $|r - r'|$ заменена просто через r]:

$$f(r \rightarrow \infty) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int \Phi(r') e^{-ik \left(\frac{r}{r'} r' \right)} dr'. \quad (11b)$$

В применении к (10) отсюда следует:

$$f_{\beta n}(r \rightarrow \infty) = \frac{M}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{ik_{\beta n} r}}{r} \int dr' e^{-ik_{\beta n} \left(\frac{r}{r'} r' \right)} \int dq \varphi_{\beta}^*(q) V(r', q) \psi_{n-1}(r', q). \quad (12)$$

Для вычисления первого приближения надо положить $n = 1$ и, следовательно, функцию ψ_{n-1} заменить на ψ_0 из (3). Величины f_{β} и k_{β} будем сокращённо обозначать через f_{β} и k_{β} . Далее определим в качестве волнового вектора k_{β} вектор, имеющий величину k_{β} , а направление — вдоль радиуса-вектора $r \rightarrow \infty$. Тогда экспоненциальная функция в первом интеграле равенства (12) принимает вид

$$e^{-i(k_{\beta} r')}. \quad (12)$$

Функция ψ_0 во втором интеграле содержит, согласно (3), экспоненциальный множитель $\exp[i(kr')]$. Этот множитель мы вынесем из-под интеграла и объединим с предыдущим в множитель вида:

$$e^{i(k - k_{\beta}, r')}.$$

¹⁾ См. также стр. 118. Это условие требует, чтобы при $r = \rho \rightarrow \infty$ функция вела себя как $\sim e^{+ik_{\rho} \rho}$, а члены, пропорциональные $e^{-ik_{\rho} \rho}$, обозначающие приходящую из бесконечности волну, отсутствовали; при этом подразумеваемая зависимость от времени предполагается взятой в форме $e^{-i\omega t}$.

²⁾ Определение простого полюса: должно быть

$$\int \frac{\partial G}{\partial n} d\sigma = 1,$$

причём интеграл распространён на поверхности, которая сколь угодно близко окружает полюс (здесь $r = r'$).

Тогда равенство (12) для первого приближения запишется следующим образом (β заменено на α):

$$f_{\alpha}(r \rightarrow \infty) = \frac{M}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_{\alpha}r}}{r} \int dr' e^{i(k-k_{\alpha}, r')} \int dq \varphi_{\alpha}^*(q) V(r', q) \varphi_0(q). \quad (12a)$$

Если последнее выражение подставить в ряд (8), то в качестве первого приближения Борна для больших r получим:

$$\psi_1 = \frac{M}{2\pi\hbar^2} \sum C_{\alpha} \frac{e^{ik_{\alpha}r}}{r} \varphi_{\alpha}(q), \quad (13)$$

где

$$C_{\alpha} = C_{0\alpha} = \int dr' e^{i(k-k_{\alpha}, r')} \int dq \varphi_{\alpha}^*(q) V(r', q) \varphi_0(q). \quad (13a)$$

Обозначение $C_{0\alpha}$ вместо C_{α} указывает на то, что до возмущения атом находился в нулевом состоянии и что в результате возмущения возбуждено состояние α . Необходимо напомнить, что величина k_{α} даётся формулой (9a) и направление вектора k_{α} совпадает с направлением радиуса-вектора $r \rightarrow \infty$. Вектор же k , как это указано в равенстве (1), имеет направление распространения падающей волны. Из всего сказанного заключаем, что величины C не являются постоянными в собственном смысле этого слова: они, правда, не зависят от q и от величины r , но, будучи зависимыми от k_{α} , они зависят от направления r .

Разъясним теперь смысл отдельных членов в бесконечном ряду (13). Каждый из этих членов по отношению к состоянию падающей частицы (зависимость от r) означает рассеянную волну, которая, начинаясь в точке нахождения атома ($r = 0$), распространяется в бесконечность. Это излучение в смысле своей фазы имеет характер шаровой волны; однако по своей интенсивности это излучение зависит от направления, как это следует из только что установленной зависимости коэффициентов C от направления. Из значения волнового числа k_{α} рассеянной волны определяется по соотношению де Бройля скорость и энергия рассеянной частицы. С другой стороны, функция $\varphi_{\alpha}(q)$ в каждом члене ряда (13) описывает состояние атома после рассеяния.

Рассмотрим прежде всего член с $\alpha = 0$. В этом случае рассеянная волна имеет волновое число k_0 , которое на основании (9a) при учёте того, что $W_{\alpha} = W_0$, определяется равенством

$$k_0^2 = \frac{2M}{\hbar^2} T = k^2. \quad (14)$$

Следовательно, скорость частиц, соответствующих рассеянной волне, равна скорости падающих частиц. Столкновение между частицей и атомом произошло упруго; состояние атома φ_0 осталось без изменения. Характеристический коэффициент C этой, упруго рассеянной волны даётся на основании (13a) выражением

$$C_{00} = \int dr' e^{i(k-k_0, r')} \int dq \varphi_0^*(q) V(r', q) \varphi_0(q). \quad (14a)$$

Рассмотрим далее член с $\alpha \neq 0$ при предположении, что $W_{\alpha} > W_0$. На основании (9a) имеем:

$$k_{\alpha}^2 = \frac{2M}{\hbar^2} [T - (W_{\alpha} - W_0)] < \frac{2M}{\hbar^2} T, \quad \text{следовательно, } k_{\alpha}^2 < k^2. \quad (15)$$

Мы имеем *неупругое* столкновение, при котором рассеиваемая частица теряет свою энергию, а рассеивающий атом возбуждается, т. е. переходит в состояние с большей энергией.

В другом случае, при $W_\alpha < W_0$, на основании (9а) имеем:

$$k_\alpha^2 > k^2. \quad (15a)$$

В этом случае атом потерял часть своей энергии, частица эту энергию приобрела. Мы имеем столкновение *второго рода*. Этот случай возможен лишь тогда, когда первоначальное состояние атома не было его наименьшим, основным энергетическим состоянием.

Для того чтобы разложение (8) было полным, необходимо, как обычно, к сумме добавить интеграл по непрерывному спектру собственных значений, распространённый по области, включающей значение W_α . При этом подинтегральное выражение для $n = 1$ имеет ту же форму, что и члены в сумме (13), с тем отличием, что теперь $\varphi_\alpha(q)$ описывает такое состояние атома, в котором электрон из атома удалён. Следовательно, эти интегральные элементы представляют *ионизационные* переходы, так что каждый элемент соответствует переходу на вполне определённый, характеризуемый значением W_α уровень непрерывного спектра (при наличии вырождения это будет один из таких уровней). Если нам необходимо вычислить суммарную вероятность таких переходов, мы должны просуммировать по всем переходам, причём это суммирование надо произвести некогерентно (квадратично). Конечно, волновое число k_α при столкновении, приведшем к ионизации, больше отличается от первоначального волнового числа k падающей частицы, чем при только что рассмотренных случаях неупругих столкновений, ведущих только к возбуждению атома. Это непосредственно видно из равенства (9а).

При определённых условиях столкновения может случиться, что $k_\alpha^2 < 0$, что возможно при $W_\alpha > T + W_0$ [см. (9а)]. Как это видно из (13), асимптотическая зависимость от r в этом случае будет иметь вид $\exp(-|k_\alpha|r)/r$. Это соответствует не рассеянию падающей частицы, а её *захвату*. При этом захвате из атома вылетает электрон особенно большой энергии. Необходимо, однако, заметить, что если захватываемой частицей является электрон, то вышеприведённые соображения не будут более состоятельными, так как необходимо в этом случае принять во внимание обменный эффект, который мы сможем разобрать лишь в гл. IX.

Для того чтобы характеризовать вероятность определённого процесса при столкновении, вводится понятие «*поперечного сечения*» атома для этого процесса. Этот способ выражения является, конечно, лишь наглядной интерпретацией волномеханических соотношений, которые (в пределах применимости приближения Борна) уже содержатся в вышеприведённых формулах. При этом как в теории, так и в эксперименте делают различие между *дифференциальным* и *полным* поперечными сечениями.

Для того чтобы определить дифференциальное поперечное сечение dQ для процесса рассеяния, характеризуемого индексом α , выделим некоторый телесный угол $d\Omega$, опирающийся своей вершиной на ядро атома и каким-либо образом ориентированный относительно падающей частицы. Вычислим поток через элемент поверхности $r^2 d\Omega$ (r достаточно велико), даваемый α -й рассеянной волной, и разделим эту величину на плотность потока, соответствующую падающей плоской волне. Падающая волна даётся функцией ψ_0 [равенство (3)]; рассеянная волна даётся α -м членом функции ψ_1 . Поток и плотность потока необходимо проинтегрировать по конфигурационному простран-

ству атома; при этом благодаря нормировке φ_0 и φ_α имеем:

$$\int |\varphi_0|^2 dq = \int |\varphi_\alpha|^2 dq = 1.$$

Как было вычислено в (1.7.76), для плотности потока в падающей волне мы получим:

$$\frac{\hbar k}{M}$$

и соответственно для потока, даваемого рассеянной волной, из выражения (13) для ψ_1 имеем:

$$\frac{\hbar k_\alpha}{M} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |C_{0\alpha}|^2 d\Omega.$$

Отсюда как отношение этих величин получается:

$$dQ_\alpha = \frac{k_\alpha}{k} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |C_{0\alpha}|^2 d\Omega. \quad (16)$$

То обстоятельство, что мы имеем здесь дело с величиной, действительно имеющей размерность поперечного сечения ($см^2$), явствует уже из самого определения: «поток, деленный на плотность потока».

Интегрируя по телесному углу $d\Omega$, получим полное поперечное сечение для процесса рассеяния α (C зависит от направления):

$$Q_\alpha = \frac{k_\alpha}{k} \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int |C_{0\alpha}|^2 d\Omega. \quad (16a)$$

Для совокупности всех процессов, дающих рассеяние, имеем:

$$Q = \sum Q_\alpha = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_\alpha \frac{k_\alpha}{k} \int |C_{0\alpha}|^2 d\Omega, \quad k_\alpha^2 > 0. \quad (16b)$$

Применения метода Борна нам не раз встретятся в дальнейшем.

Здесь необходимо лишь сделать ещё несколько замечаний об области применимости этого метода.

Прежде всего напомним о соотношении между геометрической и волновой оптикой, из которого мы исходили в гл. I, § 1. Геометрическая оптика соответствует предельному случаю $\lambda \rightarrow 0$; волновая оптика не связана с длиной волны λ и справедлива для областей самых больших длин волн (например, волны Герца). В теории оптической дифракции (или рассеяния), используя зоны Френеля или специально для этой цели сформулированный Кирхгофом принцип Гюйгенса, мы можем пользоваться геометрической оптикой при условии, что $\lambda \ll d$, где d является размером отверстия, на котором рассматривается дифракция, или диаметром рассеивающей частицы. Однако интересен также случай дифракции при условии, что $\lambda \gg d$. В этом случае принцип Гюйгенса неприменим и должен быть заменён другими формулами, связанными с разложением в ряд в теории потенциала ($\lambda \rightarrow \infty$).

Беря в качестве нулевого приближения в методе Борна прямолинейный луч [соотношение (1)], мы тем самым стали на точку зрения геометрической оптики. Следовательно, можно было бы предположить, что приближение Борна связано с условием $\lambda \ll d$, где под d следовало бы понимать некоторую меру диаметра атома. На основании соотношений де Бройля это означало бы, что

$$p = Mv \gg \hbar/d. \quad (17)$$

Следовательно, для v мы получили бы совершенно различную нижнюю границу в зависимости от того, имеем ли мы дело с электронами ($M = m$) или,

например, с α -частицами. Покажем, что это заключение не может быть верным.

Рассмотрим простейший случай рассеяния частицы (масса M произвольна, заряд равен ze) на голом ядре (заряд Ze), т. е. рассеяние в чисто кулоновском поле. Эта задача будет более подробно рассмотрена в § 6. Уравнение Шредингера этой задачи гласит:

$$\Delta\psi + \left(k^2 - \frac{2M}{\hbar^2} \frac{zZe^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (18)$$

Это уравнение не зависит ни от какой характеристической длины, кроме длины, связанной с частицей по соотношению де Бройля. Для того чтобы эту длину исключить, перейдём к новым координатам по формулам:

$$\xi = kx, \quad \eta = ky, \quad \zeta = kz$$

и в соответствие с этим введём:

$$\rho = \sqrt{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2} = kr, \quad D = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} = k^2 \Delta.$$

При этих условиях уравнение (18) переходит в уравнение

$$D\psi + \left(1 - \frac{2M}{\hbar^2} \frac{zZe^2}{k\rho} \right) \psi = 0.$$

Вставляя сюда вместо k его значение Mv/\hbar , получим:

$$D\psi + \left(1 - \frac{2e^2}{\hbar v} \frac{zZ}{\rho} \right) \psi = 0. \quad (18a)$$

Масса M исключилась из уравнения; следовательно, уравнение имеет одинаковый вид как для α -частиц, так и для электронов. Для дальнейшего упрощения введём постоянную тонкой структуры $\alpha = e^2/\hbar c$ и примем во внимание, что скорость электрона на первой боровской орбите водородоподобного атома с зарядом ядра Z равна $u = \alpha c Z$ [см., например, т. I, (II.4.3) и (II.4.8)]. Тогда (18a) принимает вид:

$$D\psi + \left(1 - 2 \frac{u}{v} \frac{z}{\rho} \right) \psi = 0. \quad (18b)$$

Возмущение состояния частицы, вызываемое ядром при пролёте частицы мимо него, даётся вторым членом в скобках. Следовательно, это возмущение зависит не от массы частицы (отвлекаясь от её заряда z), а исключительно от её скорости, именно от отношения скорости u , характерной для ядра, к скорости частицы. Если это отношение $\ll 1$, то решением уравнения (18b) будет функция (для направления оси x)

$$\psi = \psi_0 = e^{ik\xi} = e^{ikx}.$$

С другой стороны, решение мы можем искать во всяком случае в виде разложения

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \dots,$$

которое производится по степеням u/v . Таким образом, это отношение u/v прежде всего определяет в рассматриваемом случае быстроту сходимости приближения Борна. Сходимость приближения одинакова как для α -частиц, так и для электронов одинаковой скорости v , в то время как на основании критерия (17) сходимость для α -частиц вследствие чрезвычайно малой длины их волны λ должна была бы быть значительно более быстрой, чем сходи-

мость для электронов. Мы видим, что полученное условие для применимости приближения Борна гласит [ср. с (17)]:

$$v \gg u. \quad (19)$$

При перенесении этих результатов, полученных для голого ядра, на произвольный атом вместо скорости u необходимо взять скорость электронов в K -оболочке, которая, как известно, в любых атомах является водородоподобной. Для того чтобы иметь возможность избежать незаконного в волновой механике представления о «скорости в K -оболочке», мы можем говорить об энергии U_K K -границы, при этом, конечно, необходимо также и скорость частицы выразить в электрон-вольтах, т. е. заменить её через $V = \frac{\mu}{2} v^2$ (μ — масса электрона и, следовательно, в общем случае масса частицы). Тогда вместо (19) мы получим условие

$$V \gg U_K. \quad (20)$$

Для того чтобы более наглядно представить себе роль скорости в критерии (19) [критерий (20) есть тот же критерий, но записанный в других терминах], может быть, полезно оценить время действия K -электронов на пролетающую мимо частицу. Если $v \gg u$, то это время, а следовательно, и возмущение в движении частицы, наверняка будет малым. Если же $v \sim u$, то время значительно, и возмущение ψ_1 становится сравнимым с невозмущённой функцией ψ_0 . Сходимость приближения в этом случае сильно ухудшается.

То обстоятельство, что в критерии (20) K -оболочка выделена относительно оболочек L , M , имеет, конечно, то основание, что K -оболочка даёт наивысшую и поэтому наиболее сильную оценку. Иначе говоря, с уменьшением скорости частицы мы прежде всего подойдем к K -границе; поэтому при приближении к L -границе наше приближение уже перестает быть справедливым.

Критерий (20) имеет лишь качественный характер. Вопрос о том, какова должна быть скорость V по сравнению с U_K , в каждом конкретном случае требует кропотливых оценок сходимости¹⁾. При этом оказывается, что быстрота сходимости различна для различных направлений рассеяния. При не слишком малых скоростях электронов и не слишком больших номерах рассеивающих атомов (не слишком больших U_K) первое приближение Борна достаточно, однако отсюда не следует, что второе приближение²⁾ даёт улучшение результата. В случае медленных электронов, когда проявляются весьма интересные аномалии в дифференциальном сечении рассеяния, приближение Борна неприменимо. В этом случае необходимо обратиться к разложениям в ряды³⁾, аналогичным тем, которые употребляются при рассмотрении оптических задач рассеяния на маленьких частицах, или же необходимо привлечь специальные приближённые методы, аналитические⁴⁾ или численные⁵⁾.

¹⁾ С. Møller, *Zs. f. Phys.* **66**, 513 (1930); F. Distel, там же **74**, 785 (1932); J. Winter, *Thèse*, Paris, 1934.

²⁾ J. Winter, *J. de Phys.* **6**, 71 (1935).

³⁾ H. Faxén u. J. Holtzmark, *Zs. f. Phys.* **45**, 307 (1927).

⁴⁾ W. Henneberg, *Zs. f. Phys.* **88**, 555 (1933) (ВКБ-метод, комбинированный с моделью Томаса — Ферми).

⁵⁾ H. S. W. Massey u. C. B. O. Mohr, *Proc. Roy. Soc., London A* **139**, 187 (1933). См. также книгу Н. Мотт и Г. Мессис, *Теория атомных столкновений*, ИЛ, 1951.

Остаётся ответить ещё на вопрос, почему критерий (17), построенный по оптическому образцу, несправедлив для частиц. Объяснение состоит в следующем: в то время как в оптическом случае рассеиватель имеет вполне определённые размеры и вполне определённый показатель преломления, электронное облако атома не является строго ограниченным рассеивателем и обладает чрезвычайно быстро меняющимся от точки к точке показателем преломления (вблизи ядра показатель бесконечно большой и при удалении от ядра убывает, стремясь к единице). В зависимости от рода частиц наиболее существенным являются различные слои этого рассеивателя, при тяжёлых α -частицах — внутренние, при лёгких электронах — внешние. Следовательно, диаметр d мы должны считать не фиксированным, а изменяющимся приблизительно обратно пропорционально массе частицы M . Если мы это учтём, то величина массы частицы из условия $\lambda \ll d$ исключится и вместо критерия импульсов (17) мы получим критерий скоростей (19). Во всяком случае ясно, что в приближении Борна дело идёт не только о малости волны де Бройля, хотя само приближение строится по образцу приближений геометрической оптики.

§ 6. ФОРМУЛА РЕЗЕРФОРДА И ЕЁ ОБОБЩЕНИЕ

Исторически эта формула образовала фундамент всей атомной физики. Именно эта формула, как известно, привела Резерфорда в 1911 г. к созданию новой модели атома. Резерфорд получил её с помощью вычислений, основанных на классической механике (гиперболическое движение в кулоновском поле ядра — кометные орбиты в гравитационном поле солнца). Мы покажем, что эта формула является точной также и с точки зрения волновой механики.

А. Волномеханическое обоснование формулы Резерфорда. Дело идёт о рассеянии α -частицы на голом ядре, следовательно (при предположении о бесконечной массе ядра), о проблеме одного тела. Собственными функциями будут собственные функции атома водорода при положительных собственных значениях. Эти собственные функции изучены в гл. II, § 7 (полярные координаты) и § 9 (параболические координаты). Для целей настоящей задачи более подходящей является последняя форма этих функций¹⁾. Функции, найденные в (II. 9.29), имеют вид:

$$\psi = e^{ikx} L_n(ikr) \begin{cases} \eta = r - x, \\ n = \frac{Z}{ika}, \quad a = \frac{\hbar^2}{MeE}, \end{cases} \quad (1)$$

где n — определённое в (II. 7.10) число, заменяющее «главное квантовое число»; a — «радиус атома водорода», E — заряд, M — масса α -частицы. На основании (II. 9.30) асимптотическое поведение функций (1) характеризуется следующими формулами:

$$\left. \begin{aligned} \psi_\infty &= C_1 e^{ikx} + C_2 \frac{e^{ikr}}{r}, \\ C_1 &= \frac{(-ik\eta)^n}{\Gamma(1+n)}, \quad C_2 = \frac{(+ik\eta)^{-n} \ln r}{\Gamma(1-n) k\eta}. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Это асимптотическое представление функции складывается из плоской волны $C_1 e^{ikx}$ и сферической волны $C_2 e^{ikr}/r$, рассеянной на ядре ($r = 0$). В общем

¹⁾ В полярных координатах формула рассеяния выведена в работах: W. Gordon, *Za. f. Phys.* 46, 180 (1928) и N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc., London*, A118, 542 (1928).

случае «амплитуды» C_1 и C_2 не являются постоянными и зависят ещё от η . Принимая это во внимание, запишем отношение «интенсивности рассеянной волны на единицу телесного угла к интенсивности падающей волны на единицу поверхности» следующим образом:

$$\left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2 = \left| \frac{(+ik\eta)^{-n}}{(-ik\eta)^n} \right|^2 \left| \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(1-n)} \right|^2 \left| \frac{inr}{k\eta} \right|^2. \quad (3)$$

В этом выражении два первых множителя в правой части равны единице, так как n чисто мнимо. Если мы через Θ обозначим угол между направлением падающей частицы (ось x) и направлением рассеянной частицы, то при учёте (1) найдём:

$$\eta = r - x = r(1 - \cos \Theta) = 2r \sin^2 \frac{\Theta}{2},$$

$$\frac{in}{k} = \frac{Z}{k^2 a} = \frac{ZMeE}{k^2 \hbar^2} = \frac{ZMeE}{(Mv)^2} = \frac{ZeE}{Mv^2}.$$

Отсюда

$$\left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2 = \left| \frac{inr}{k\eta} \right|^2 = \left(\frac{eEZ}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}}. \quad (4)$$

Это выражение и есть *формула Резерфорда*¹⁾.

Полученный результат может быть непосредственно переписан в виде дифференциального поперечного сечения. Для этого выражение справа необходимо умножить на дифференциал телесного угла $d\Omega$: выражение (4) было, как это подчёркивалось, выведено для «единицы телесного угла», следовательно, для $d\Omega = 1$. Таким образом, вместо (4) получим:

$$dQ = \left(\frac{eEZ}{2Mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}}. \quad (4a)$$

Как показывает вышеприведённое вычисление, рассеяние на голом ядре не принадлежит к задачам теории возмущения, а скорее примыкает к задаче Кеплера (гл. II). Однако распространение этой формулы на атомы с электронными оболочками, которое необходимо произвести, возможно лишь с помощью теории возмущений. При этом мы в основу положим метод Борна из § 5. В качестве подготовки полезно с помощью этого метода рассмотреть рассеяние на голом ядре. Ядро предполагается закреплённым в начале координат. Столкновение между частицей (например, α -частицей) и ядром происходит упруго. Поэтому для вычисления поперечного сечения мы должны использовать равенство (5.14a), в котором $\varphi(q)$ означает волновую функцию атома, т. е. в нашем случае — волновую функцию ядра.

Поскольку ядро неподвижно закреплено в начале координат, то если мы вообще хотим говорить о волновой функции ядра, мы должны считать $\varphi(q) = 0$ для $q > 0$, но

$$\int \varphi^*(q) \varphi(q) dq = 1 \quad \text{и} \quad \int \varphi^*(q) V(r, q) \varphi(q) dq = V(r, 0). \quad (5)$$

Взаимодействие между рассматриваемой частицей, находящейся в точке r , и ядром, находящимся в точке 0, является кулоновским. Поэтому

$$V(r, 0) = \frac{-eEZ}{r}. \quad (5a)$$

¹⁾ Формула рассеяния при некулоновском поле ядра, например для потенциальной ямы, рассматривается в работе Th. Sexl, *Za. f. Phys.* 67, 766 (1931).

Равенство (5.14а) переписывается тогда в виде:

$$C_{00} = -eEZ \int \frac{dr}{r} e^{i(k-k_0, r)}, \quad (6)$$

где k есть волновой вектор рассеянной волны, k_0 — волновой вектор падающей волны. В случае упругого столкновения имеем:

$$|k| = |k_0| = k. \quad (6a)$$

В соответствии с рис. 24 положим:

$$k = ke, \quad k_0 = ke_0, \quad (6b)$$

где e и e_0 являются единичными векторами. Интегрирование в (6) легко может быть выполнено при подходящем выборе полярной системы координат, у которой полярная ось OA направлена параллельно вектору разности $e_0 - e$. Координаты точки интегрирования r в этой системе пусть будут r, ϑ, φ , причём

$$r = |r|, \quad \vartheta = \sphericalangle AOQ, \\ \varphi = \sphericalangle \text{вокруг } OA. \quad (6в)$$

Тогда имеем:

$$(e_0 - e, r) = |e_0 - e| r \cos \vartheta.$$

Рис. 24. Рассеяние пучка α -частиц ядром, находящимся в точке O .

Как видно из рисунка, разность $|e_0 - e|$ является основанием равнобедренного треугольника, у которого боковые стороны равны единице и угол при вершине O равен Θ ($\Theta = \sphericalangle XOP$ — угол отклонения или угол рассеяния). Следовательно,

$$|e_0 - e| = 2 \sin \frac{\Theta}{2}, \quad (e_0 - e, r) = 2r \sin \frac{\Theta}{2} \cos \vartheta. \quad (6г)$$

Таким образом, получается:

$$C_{00} = -2\pi eEZ \int_0^\infty r dr \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta e^{-2ikr \sin \frac{\Theta}{2} \cos \vartheta}. \quad (7)$$

Интегрирование по ϑ даёт:

$$C_{00} = -\frac{2\pi eEZ}{k \sin \frac{\Theta}{2}} \int_0^\infty dr \sin qr, \quad q = 2k \sin \frac{\Theta}{2}. \quad (7a)$$

Этот интеграл, однако, расходится.

Для того чтобы обеспечить сходимость интеграла, можно формально¹⁾ ввести в подынтегральное выражение «множитель сходимости»:

$$e^{-pr}, \quad p > 0,$$

¹⁾ G. Wentzel, *Za. f. Phys.* 40, 590 (1927).

и после выполнения интегрирования устремить p к нулю. Тогда получим:

$$\int_0^{\infty} dr e^{-pr} \sin qr = \frac{q}{p^2 + q^2} = \frac{1}{q} \quad \text{для } p \rightarrow 0.$$

Поэтому из (7а) [ср. также (5.14)] следует, что

$$C_{00} = \frac{-\pi eEZ}{k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{2\pi\hbar^2}{M} \frac{eEZ}{2Mv^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (76)$$

Но тогда равенство (5.16), детализированное для случая упругого столкновения, даёт нам снова точно формулу Резерфорда, а именно:

$$dQ = |C_{00}|^2 \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^2 d\Omega = \left(\frac{eEZ}{2Mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (8)$$

Этот результат не является само собой разумеющимся, поскольку приближение Борна, как это было выяснено, справедливо лишь для случая больших скоростей, в то время как формула Резерфорда в случае голого ядра, как показано, является точной формулой.

Б. Обобщение формулы Резерфорда на случай нейтрального атома. В случае ядра, окружённого полностью электронным облаком, трудность с расходимостью интеграла отпадает. Считаем, что плотность электронного облака определяется заданием функции $\rho(r')$. Предполагая атом неподвижным, мы, вообще говоря, несколько отклоняемся от общей схемы приближения Борна, согласно которой (см. начало § 5) степени свободы атома должны оставаться ничем не ограниченными в процессе вычисления. Принятая здесь картина закреплённого электронного облака не приводит к дополнительным степеням свободы, и задача на возмущение решается в пространстве трёх измерений сталкивающейся частицы. Такое упрощение задачи возможно в случае упругих столкновений, которыми мы здесь и ограничимся; для неупругих столкновений такое упрощение невозможно.

Взаимодействие частицы E с атомом мы ранее описывали с помощью функции $V(r, q)$. Положим теперь $q = r'$, r' — произвольная точка облака. Предполагая, что в этой точке находится электрон (заряд e), мы имеем:

$$V(r, r') = \frac{eE}{|r - r'|}.$$

Далее, величина $\varphi^*(q)\varphi(q)dq$ в интегралах (5) означает плотность частиц $\rho(r')dr'$ в элементе объёма dr' облака. Следовательно, второй из интегралов (5), поскольку он получается за счёт учёта электронного облака, равен теперь:

$$eEV_1, \quad V_1 = \int \frac{\rho(r')dr'}{|r - r'|}. \quad (9)$$

Прибавив сюда долю потенциала за счёт ядра (5а), в целом имеем:

$$\int \varphi^*(q)V(r, q)\varphi(q)dq = -eEU, \quad U = \frac{Z}{r} - V_1. \quad (9a)$$

При произвольном распределении ρ потенциал V_1 нельзя, конечно, вычислить элементарно. Однако V_1 подчиняется дифференциальному уравнению

$$\Delta V_1 = -4\pi\rho$$

и поэтому также (кроме точки $r = 0$)

$$\Delta U = -4\pi\rho. \quad (10)$$

Далее нам необходимо вычислить не значения самих V_1 или U , но на основании (5.14а) значение интеграла

$$C_{00} = -eE \int dr e^{i(k-k_0)r} U. \quad (11)$$

Этот интеграл может быть преобразован по формуле Грина. Заметим, что функция

$$u = e^{i(k-k_0)r} \quad (12)$$

удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\Delta u + |k - k_0|^2 u = 0, \quad (12a)$$

причём на основании (6а, в, г) имеют место равенства

$$|k - k_0|^2 = k^2 |e_0 - e|^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Следовательно, принимая во внимание (12а), мы имеем:

$$\int dr u \Delta U = - \frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \int dr \Delta u U. \quad (12б)$$

Но на основании формулы Грина получим:

$$\int dr \Delta u U = \int dr u \Delta U + 4\pi Z, \quad (12в)$$

причём добавленный член $4\pi Z$ соответствует сингулярности U в нулевой точке.

Учитывая равенства (11), (12б, в), запишем:

$$C_{00} = \frac{-eE}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \left(4\pi Z + \int dr u \Delta U \right)$$

и, следовательно, принимая во внимание (10),

$$C_{00} = \frac{-\pi eE}{k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} (Z - F), \quad (13)$$

где обозначено

$$F = \int dr \rho(r) e^{ik(e-e_0)r}. \quad (14)$$

Величина F называется «атомным формфактором». Эта величина первоначально была введена в задачах, связанных с рентгеновским излучением, и встретится нам в этой связи ещё раз в гл. VIII. Даже тогда, когда распределение плотности является приближённо центрально-симметричным [$\rho(r) = \rho(r)$], величина F не есть просто число, но зависит от угла между направлением падения частицы e_0 и направлением её рассеяния e . Значение (13) для C_{00} отличается от ранее полученного значения (7б) только тем, что теперь вместо Z стоит разность $Z - F$. Точно такую же замену надо сделать и в формуле (8). Поперечное сечение рассеяния нейтрального атома записы-

вается аналогично формуле Резерфорда в виде:

$$dQ = \left[\frac{eE(Z-F)}{2Mv^2} \right]^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}}. \quad (15)$$

Эту формулу впервые вывел Мотт¹⁾.

Заметим, что в этом случае мы не встретились с расходимостью интеграла и не были вынуждены применить несколько искусственной приём введения «множителя сходимости». Разность U между потенциалами ядра Z/r и потенциалом V_1 электронного облака нейтрального атома убывает с расстоянием $r \rightarrow \infty$ таким образом, что сходимость интеграла (11) оказывается обеспеченной.

Правда, в специальном случае α -частицы обобщение (15) формулы Резерфорда в общем несущественно, так как ввиду большого значения величины $k = Mv/\hbar$ атомный формфактор оказывается величиной чрезвычайно малой и в общем этой величиной можно пренебречь по сравнению с Z . Выражение «в общем» означает здесь «для $\Theta > 0$ ». Для $\Theta = 0$ наличие в формуле Резерфорда величины F ликвидирует расходимость этой формулы в точке $\Theta = 0$.

Именно, разлагая экспоненциальную функцию подинтегрального выражения (14) в ряд для малых значений Θ с учётом (6г), получаем (ρ предполагается сферически симметричной функцией):

$$F = \int dr \rho(r) - 2k^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2} \int dr \rho(r) r^2 + \dots \quad (16)$$

Первый член равен заряду Z , интеграл во втором члене имеет форму интеграла для вычисления центра тяжести распределения электронов и может быть положен равным Za^2 (a — «расстояние до центра тяжести»). Тогда из (16) следует:

$$(Z - F)^2 = (2k^2 a^2 Z)^2 \sin^4 \frac{\Theta}{2} + \dots$$

так что при подстановке этого выражения в (15) величина в знаменателе сокращается.

То же самое заключение справедливо и для случая электронов ($M = m$, $E = e$) с той только разницей, что теперь ввиду меньших значений величин k величиной F нельзя пренебрегать по сравнению с Z при $\Theta > 0$. Как было указано в примечании на этой странице, равенство (15) даёт вполне удовлетворительное объяснение экспериментальных фактов при не слишком малых v . Эти особенности требуют специального анализа.

В. Корпускулярный вывод формулы Резерфорда. Наиболее простым здесь является путь, примыкающий к тому, которым мы следовали в т. I, гл. V, § 1. Проведём прямую линию в направлении движения частицы в начальный момент времени. Пусть эта линия проходит на расстоянии ρ от начала координат точки, в которой находится отклоняющее

1) N. F. Mott, Proc. Roy. Soc., London, A127, 658 (1930). В «Дополнительном томе» (первое издание настоящей книги) на основании очень специальной модели атома была выведена формула, которая значительно отличается от формулы Резерфорда, и, казалось, была подтверждена опытами по рассеянию Ф. Кирхнера (рассеяние электронов на неоне). Однако, как мне любезно сообщил Кирхиер, он после тщательного исследования считает прежние свои результаты недоказанными. Новые работы, особенно работы Кембриджской школы, подтверждают в целом формулу Мотта в пределах её применимости (v не слишком малой). См. также гл. IX монографии Мотта и Мессис. (Теория атомных столкновений, ИЛ, 1951.)

ядро; величину p называют «прицельным расстоянием». Запишем интегралы моментов и энергии в полярных координатах на плоскости (рис. 25):

$$r^2 \dot{\varphi} = p v, \quad \frac{M}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{eEZ}{r} = \frac{M}{2} v^2, \quad (17)$$

где Mpv есть первоначальный момент, $\frac{M}{2} v^2$ — первоначальная кинетическая энергия α -частицы на бесконечно большом расстоянии от ядра. Во втором уравнении (17) вынесем $\dot{\varphi}^2$ за скобки и заменим величину $\dot{\varphi}$ её значением на основании первого уравнения (17); далее рассматриваем φ как независимую переменную, а величину $s = \frac{1}{r}$ как зависимую.

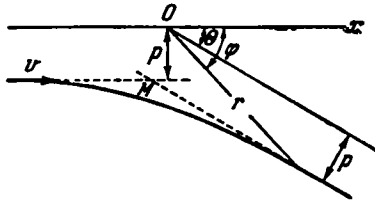


Рис. 25. Отклонение α -частицы ядром по классической механике.

Тогда получим:

$$\frac{M}{2} p^2 v^2 \left[\left(\frac{ds}{d\varphi} \right)^2 + s^2 \right] - eEZs = \frac{M}{2} v^2.$$

Для того чтобы получить линейное дифференциальное уравнение, продифференцируем это уравнение по φ и сократим на общий множитель $\frac{ds}{d\varphi}$; в результате получим:

Для того чтобы получить линейное дифференциальное уравнение, продифференцируем это уравнение по φ и сократим на общий множитель $\frac{ds}{d\varphi}$; в результате получим:

$$\frac{d^2 s}{d\varphi^2} + s = C, \quad C = \frac{eEZ}{Mp^2 v^2}. \quad (18)$$

Общее решение этого уравнения имеет вид:

$$s = C + A \cos \varphi + B \sin \varphi. \quad (18a)$$

Начальные условия $\varphi = \pi$, $s = 0$ (см. рис. 25) дают

$$A = C. \quad (18b)$$

Далее, в начальном состоянии мы имеем $y = r \sin \varphi = p$. Следовательно,

$$\frac{1}{p} = \left(\frac{s}{\sin \varphi} \right)_{\varphi=\pi} = C \left(\frac{1 + \cos \varphi}{\sin \varphi} \right)_{\varphi=\pi} + B. \quad (18в)$$

Отсюда, в силу того что множитель при C обращается в нуль, получаем:

$$B = \frac{1}{p}. \quad (18г)$$

Обозначим угол между осью ox и асимптотой к траектории частицы после взаимодействия через Θ . Тогда (18a) с учётом (18г) даёт:

$$\left. \begin{aligned} C(1 + \cos \Theta) &= -\frac{1}{p} \sin \Theta, \\ \operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} &= -\frac{1}{Cp} = \frac{Mpv^2}{eEZ}. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Уравнение (18a) есть уравнение гиперболы в полярных координатах, точка O — её (внешний) фокус; центр M на рисунке построен как точка пересечения асимптот.

Пусть число частиц, падающих на единицу поверхности, равно n ; тогда число частиц, падающих на кольцо с внутренним и внешним радиусами, рав-

ными p и $p + dp$, равно

$$dN = n2\pi p dp. \quad (20)$$

Эти частицы будут рассеяны в область, расположенную между конусами, поверхности которых направлены под углами θ и $\theta + d\theta$ к оси x . Телесный угол, заключённый между этими конусами, обозначим через $d\Omega$. Следовательно, мы имеем:

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (20a)$$

Из (19) следует:

$$p^2 = \left(\frac{eEZ}{Mv^2}\right)^2 \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2}.$$

Отсюда дифференцированием получается:

$$p dp = \frac{1}{2} \left(\frac{eEZ}{Mv^2}\right)^2 \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (20б)$$

Подстановка этого выражения в (20) и исключение $d\theta$ с помощью (20a) даёт:

$$dN = \frac{n}{2} \left(\frac{eEZ}{Mv^2}\right)^2 \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} d\Omega}{\sin \theta \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (20в)$$

Заменим здесь $\sin \theta$ через $2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$ и найдём отношение числа отклонённых частиц к числу падающих:

$$dQ = \frac{dN}{n}. \quad (21)$$

Тогда сразу получается формула Резерфорда:

$$dQ = \left(\frac{eEZ}{2Mv^2}\right)^2 \frac{dN}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (22)$$

§ 7. ДИФФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА КРИСТАЛЛАХ И ВОПРОСЫ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ

В обыкновенной оптике, как известно, различают диффракцию на отдельном объекте (щель, диск) и диффракцию на системе регулярно расположенных объектов (линейная решётка, двумерная решётка, пространственная решётка). В обоих предыдущих параграфах мы рассматривали огибание материальными волнами отдельных препятствий (ядро, атом). Теперь мы рассмотрим диффракцию на решётках, или, иначе говоря, *диффракцию* материальных волн *на кристаллах*.

Первые опыты в этой области, которые как никакие другие иллюстрируют дуализм волн и частиц, были, как известно, проведены Дэвиссоном и Джермером ¹⁾. Ими изучалась диффракция электронов средних скоростей на монокристаллах никеля. Наблюдаемая картина представляла собой правильно расположенные пятна Лауэ. Это расположение пятен отражает характер

¹⁾ С. J. Davisson a. L. H. Germer, Phys. Rev. 30, 705 (1927); Nature 119, 558 (1927); Proc. Nat. Acad. 14, 317 (1928), а также H. Bethe, Ann. d. Phys. 87, 55 (1928).

симметрии монокристалла, так же как и при дифракции рентгеновских лучей. Не менее убедительными являются более поздние опыты с тонкими металлическими фольгами микрокристаллической структуры; первые снимки этого рода были опубликованы Томсоном¹⁾. Наблюдаемое явление точно соответствует кольцам Дебая—Шерера, известным из рентгеновского анализа.

Однако наиболее хорошо выполненные и многообразные снимки дифракционных картин были получены Кикучи²⁾, изучавшим дифракцию электронов большой скорости на слюде. В зависимости от толщины пластинок слюды получались картины дифракции от плоской решётки, правильные картины Лауэ или сложные картины, пересекаемые тёмными и светлыми линиями. Здесь мы ограничимся некоторыми замечаниями по теории, разъясняющей результаты опытов Дэвиссона и Джермера, отсылая для более детального изучения всех этих вопросов к работе Фюсса³⁾.

В этих опытах, проводимых в вакууме, пучок электронов одинаковой скорости падает вертикально на поверхность кристалла [плоскость октаэдра (111)]; наблюдение велось электрометрическим путём со стороны падения пучка. Ускоряющее напряжение в отдельных опытах варьировалось между 30 и 370 в.

При 100 в ускоряющего напряжения скорость электронов равна

$$v = \sqrt{\frac{2e}{m} V \cdot 10^8} = 6 \cdot 10^8 \text{ см/сек.}$$

Отсюда, пользуясь соотношениями де Бройля, получим:

$$\lambda = 1,2 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 1,2 \text{ \AA}.$$

Эти результаты можно объединить в следующую мнемоническую формулу:

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}}, \quad (1)$$

где напряжение V берётся в вольтах, λ — в ангстремах. Поэтому изменению ускоряющего напряжения в пределах от 30 до 370 в соответствует изменение длины волны от 2,2 до 0,6 Å.

В дальнейшем мы будем «длину волны в воздухе» обозначать через Λ и отличать её от длины волны λ в кристалле. Отношение этих величин есть «показатель преломления», который мы будем обозначать через μ :

$$\mu = \frac{\Lambda}{\lambda}. \quad (2)$$

В то время как показатель преломления рентгеновских лучей почти точно равен единице (лишь явление полного отражения при почти касательном направлении луча показывает, что показатель преломления на несколько миллионов меньше единицы), опыты Дэвиссона и Джермера при правильной интерпретации показывают, что показатель преломления электронных волн заметно больше единицы. Это обстоятельство даёт ключ к количественному обсуждению опытов.

1) G. P. Thomson, Proc. Roy. Soc. London, A117, 600 (1928); 119, 651 (1928).

2) S. Kikuchi, Japanese Journ. of Physics 5, 83 (1928); Phys. Zeitschr. 31, 777 (1930).

3) E. Fues, Handbuch der Experimental Physik, Erg., т. II, Leipzig, 1935.

Исходим из основных уравнений теории Лауэ для явлений интерференции при прохождении решётки [т. I, гл. IV, уравнения (1.3)]:

$$\left. \begin{aligned} a(\alpha - \alpha_0) &= n_1 \lambda, \\ b(\beta - \beta_0) &= n_2 \lambda, \\ c(\gamma - \gamma_0) &= n_3 \lambda. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Оси координат, к которым относятся направляющие косинусы α , β , γ и α_0 , β_0 , γ_0 отклонённого и падающего луча, предполагаются расположенными перпендикулярно друг к другу и будут обозначаться индексами 1, 2, 3. Постоянные a , b , c и порядковые числа интерференции n_1 , n_2 , n_3 относятся соответственно к этим осям.

Направления 1 и 2 выберем в плоскости (111), направление 3 будет, следовательно, идти по нормали к этой плоскости. Никель, как и многие металлы, образует кубически-центрированную решётку. В плоскости (111) атомы N_i образуют сетку равнобедренных треугольников. В качестве направления 1 мы можем выбрать сторону, а в качестве направления 2 — высоту одного из этих равнобедренных треугольников. Уравнения (3) относятся к внутренности кристалла, это отмечено присутствием величины λ . Однако наблюдения производятся вне кристалла. Поэтому уравнение (3) необходимо преобразовать к величинам, относящимся к области вне кристалла.

Так же как мы различаем λ и Δ , мы должны делать различие между углами ϑ и φ внутри кристалла и углами Θ и Φ — вне кристалла. Полагаем:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \sin \vartheta \cos \varphi, & \beta &= \sin \vartheta \sin \varphi, & \gamma &= \cos \vartheta, \\ \alpha_0 &= \sin \vartheta_0 \cos \varphi_0, & \beta_0 &= \sin \vartheta_0 \sin \varphi_0, & \gamma_0 &= \cos \vartheta_0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

На основании законов преломления для перехода воздух \rightleftharpoons кристалл как для падающего, так и для отклонённого луча мы имеем:

$$\frac{\sin \Theta_0}{\sin \vartheta_0} = \frac{\sin \Theta}{\sin \vartheta} = \mu, \quad \Phi_0 = \varphi_0, \quad \Phi = \varphi. \quad (5)$$

Выражая ϑ , φ , λ через Θ , Φ , Δ , из уравнения (3) получим:

$$\left. \begin{aligned} a \left(\frac{\sin \Theta}{\mu} \cos \Phi - \frac{\sin \Theta_0}{\mu} \cos \Phi_0 \right) &= n_1 \frac{\Delta}{\mu}, \\ b \left(\frac{\sin \Theta}{\mu} \sin \Phi - \frac{\sin \Theta_0}{\mu} \sin \Phi_0 \right) &= n_2 \frac{\Delta}{\mu}, \\ c \left(\sqrt{1 - \frac{\sin^2 \Theta}{\mu^2}} - \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \Theta_0}{\mu^2}} \right) &= n_3 \frac{\Delta}{\mu}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Из двух первых уравнений величина показателя преломления μ исключилась; эти уравнения имеют в переменных Δ , Θ , Φ вид, одинаковый с соответствующими уравнениями (3) в переменных λ , ϑ , φ . Это означает, что диффракция на плоской решётке, совпадающей с ограничивающей плоскостью, в которой лежат направления 1 и 2, происходит таким же образом, как диффракция рентгеновских лучей с длиной волны Δ , т. е. так, как будто показатель преломления $\mu = 1$. Напротив, в третье уравнение (6) величина μ входит существенно; это уравнение отличается от соответствующего уравнения (3). Отсюда следует, что размеры кристалла в направлении оси 3 будут

казаться искажёнными, если мы их будем рассчитывать так же, как для рентгеновских лучей, т. е. без учёта показателя преломления.

Именно это заключение вывели Дэвиссон и Джермер из своих первых опытов: согласие с общими соотношениями между длинами волн и углами отклонения в том виде, в каком они следуют для плоской решётки из первых двух уравнений Лауэ; различие в отношении выбора длин волн, коль скоро эффект определяется прибавлением третьего уравнения Лауэ, т. е. переходом к пространственной решётке. Это последнее составляло отличие от соответствующих опытов с рентгеновскими лучами. Дэвиссон и Джермер объяснили кажущееся искажение предварительным предположением, что в направлении вглубь кристалла происходит сжатие решётки на 70%.

Прежде всего выясним теоретически причину этого кажущегося искажения. Для этого воспользуемся уравнением Шредингера, которое для настоящей задачи запишем в следующем виде:

$$\Delta\psi + \frac{2m|e|}{\hbar^2}(W + V)\psi = 0. \quad (7)$$

В этой записи уравнение отличается от употребляемого нами ранее тем, что мы добавили во втором члене слева множитель e и изменили знак V на обратный. Это означает, что теперь величина $|e|W$ является энергией электрона, а величина $-|e|V$ его потенциальной энергией в соответствующей точке. Если, как обычно, энергия электрона будет измеряться в электрон-вольтах eV , то W будет непосредственно равно числу вольт, а V — электрическому потенциалу, измеренному в вольтах (с точностью до несущественного для дальнейшего множителя 10^8 или $1/300$ в зависимости от того, измеряется ли e в магнитных или электрических единицах). Величина W , являясь собственным значением полной задачи, имеет одно и то же значение как в вакууме, так и в кристалле, если мы принимаем во внимание только упругие столкновения, что здесь и предполагается. Величина же V на границе раздела, как это в дальнейшем упрощённо предполагается, терпит разрыв. В вакууме (вне кристалла) мы должны положить $V = 0$; в кристалле величина изменяется периодически, однако таким образом, что среднее значение её V_0 положительно. Действительно, в металле электрон находится в стабильном равновесии. Следовательно, его потенциальная энергия $-|e|V$ здесь по сравнению с его энергией вне кристалла должна быть отрицательной. Но это как раз и означает, что V_0 должно быть положительно. Мы можем считать внутренность кристалла потенциальной ямой для отрицательного электрона. Для того чтобы извлечь электрон из этой «ямы», необходимо совершить работу (эффект Ричардсона). Напротив, при попадании электрона извне в металл его скорость увеличивается. Но так как по соотношению де Бройля длина волны обратно пропорциональна скорости, то отсюда следует, что длина дебройлевской волны электрона внутри металла меньше, чем длина волны в вакууме. Но это на основании (2) означает, что

$$\mu = \frac{\Lambda}{\lambda} > 1. \quad (7a)$$

Металл для электронных волн является оптически более плотной средой. Наклонно падающий пучок электронов отклоняется в сторону нормали; при выходе пучка электронов из металла возможно полное внутреннее отражение.

Определим численную величину показателя преломления. Если мы проинтегрируем уравнение (7), подставив вместо ψ выражение плоской волны, и заменим V её средним значением V_0 , то волновое число будет равняться корню квадратному из величины, стоящей в этом уравнении множителем

при ψ . С другой стороны, ввиду того что длина волны обратно пропорциональна волновому числу, из (7) немедленно следует:

$$\mu = \frac{\lambda'}{\lambda} = \sqrt{\frac{W+V_0}{W}} = \sqrt{1 + \frac{V_0}{W}}. \quad (8)$$

Это равенство совпадает с равенством (IX) из гл. I, § 4. Неравенство (7a) согласуется с неравенствами (IXa) этой главы. Наблюдения Дэвиссона и Джермера дали возможность экспериментально определить μ и тем самым V_0 . Конечно, при этом отдельные максимумы должны быть правильно истолкованы, т. е. правильно отнесены к соответствующей отражающей плоскости внутри кристалла. В нижеприведённой таблице использована интерпретация, отличная от той, какую первоначально дали Дэвиссон и Джермер (в Nature), и согласуется с той, которую авторы дали в своей окончательной работе (в Phys. Rev.).

В первой колонке приведены энергии падающих электронов в вольтах; при этом из всех опытов выбраны лишь некоторые. Селективность процесса и пространственный характер влияния решётки выражаются в том, что каждый максимум наиболее ярко выражен при вполне определённой скорости (именно при энергии, приведённой в первой колонке). Вторая колонка даёт длины волн вне кристалла, вычисленные на основании соотношения

W (вольт)	Λ (Å)	λ (Å)	μ	V_0 (вольт)
54	1,67	1,49	1,12	13
106	1,19	1,13	1,06	11,5
160	0,97	0,92	1,05	14
188	} 0,89	0,85	1,04	15
190				
310	0,70	0,68	1,03	16
370	0,64	0,62	1,03	25

де Бройля. Третья колонка показывает длины волн внутри кристалла, вычисленные на основании теории Лауэ в смысле равенств (3) (или на основании равноценного условия Брэгга). В четвёртой колонке вычислено отношение Λ к λ , т. е. коэффициент μ . Убывание μ при перемещении сверху вниз по колонке (возрастание скоростей) согласуется с равенством (8), на основании которого μ должно быть тем ближе к единице, чем больше скорость. Равенство (8) также показывает, каким образом, зная μ , вычислить значение V_0 (последняя колонка таблицы). Среднее значение V_0 из всех измерений Дэвиссона и Джермера оказывается равным 15 в.

Эта величина является очень важной для уяснения природы металлов. На основании сказанного выше, она нам непосредственно даёт величину работы выхода, которую должен совершить электрон, чтобы выйти из металла, в то время как эффект Ричардсона позволяет вычислить не непосредственно величину этой работы, а лишь избыток работы над работой давления, оказываемого электронами проводимости внутри металла на покидающий металл электрон. То обстоятельство, что при помощи опытов по диффракции электронов возможно отдельно определить величину работы V_0 , указывает на то, что влетающие в металл электроны принадлежат совсем другой области (более высоких) скоростей, чем электроны проводимости. Это обстоятельство указывает также на то, что принцип Паули, которому подчиняется распределение скоростей электронов проводимости, не накладывает каких-либо ограничений на движение быстрых, влетающих в металл электронов.

Тот факт, что для перехода металл \rightarrow вакуум $\mu' = \frac{1}{\mu} < 1$, позволяет предсказать явление полного внутреннего отражения для тех электронов, которые при выходе из металла встречают поверхность раздела металл — вакуум под достаточно малыми углами. И действительно, наблюдения Дэвис-

сона и Джермера показали, что в некоторых направлениях, в которых, согласно неисправленной теории Лауэ, должны были бы наблюдаться электроны, в действительности они вне металла не наблюдаются.

Равенство (8) показывает, что в случае быстрых электронов $W \gg V_0$, значение показателя преломления μ приближается к единице. Количественные соотношения в этом случае будут вполне аналогичны количественным соотношениям для рентгеновских лучей. Поэтому кольца, наблюдавшиеся Томсоном (см. выше) и многими другими в опытах с быстрыми электронами (порядка $W = 30 \text{ кв}$), могут быть интерпретированы как кольца Дебая — Шеррера в рентгеновской спектроскопии; при этом в обоих случаях получаются одни и те же значения для постоянных решётки.

Сказанным выше сделан лишь первый шаг к полной теории дифракции электронов на кристаллах. Точно так же как наиболее тонкие черты интерференции рентгеновских лучей не учитывались кинематической теорией Лауэ и потребовали для своего объяснения создания динамической теории Эвальда¹⁾, так и в случае дифракции электронов на кристаллах необходимо перейти к более точной теории. Для этого надо прежде всего разложить в ряд Фурье переменный потенциал V и выбрать собственную функцию ψ в соответствующей форме. Таким путём удаётся в первом приближении ввести коэффициент преломления μ . Во втором приближении определяется ширина максимумов отражения, а также сдвиг их положения по сравнению с предсказываемым элементарной теорией. Из ослабления, которое испытывает электронная волна при отражении, вычисляется число атомных плоскостей, которое эта электронная волна могла пройти; это число в опытах Дэвиссона и Джермера составляло примерно от 10 до 100; при этих расчётах пренебрегают возможностью ослабления электронной волны за счёт неупругих столкновений электронов с ионами металлов. Благодаря последнему обстоятельству это число оказывается преуменьшенным, а в опытах Дэвиссона и Джермера вероятно значительно, так как при использованных ими скоростях будут происходить процессы возбуждения. Наконец, из этих расчётов может быть теоретически получено среднее значение потенциала, т. е. работа выхода V_0 , которую мы выше получили из эксперимента. Для этого необходимо использовать определённую волномеханическую, более или менее водородоподобную, модель атома металла. Полученное таким образом значение V_0 для никеля согласуется весьма хорошо с вышеприведённой величиной 15 в. Более подробно лишь бегло намеченная здесь теория изложена в основной работе Бете, цитированной в примечании, стр. 343 и также в статье того же автора в Handb. d. Phys., XXIV, 2, 2-е изд., № 23 и след.²⁾

§ 8. ПОПРАВКА НА СПИН КАК ВОЗМУЩЕНИЕ

Если мы попытаемся приближённо решить уравнение Дирака, исходя из уравнения Шредингера, то получим особую задачу теории возмущений. Это можно сделать, пользуясь связью между релятивистским уравнением Шредингера и квадрированным уравнением Дирака, которое получено в гл. IV, § 2 [уравнение (10)]. Левая часть этого уравнения, приравненная нулю, даёт релятивистское уравнение Шредингера из гл. IV, § 1; это уравнение не зависит от γ . Правую часть, содержащую шесть γ -произведений, мы назовём «спиновой поправкой».

¹⁾ P. P. Ewald, Ann. d. Phys. 54, 519 (1918); см. также Handb. d. Phys. XXIII, 2, 2-е изд., Berlin, Julius Springer, 1926.

²⁾ Русский перевод: Бете, Квантовая механика простейших систем, М. — Л., 1935. (Прим. ред.)

Для того чтобы практически провести вычисления, ограничимся стационарным случаем и положим вектор-потенциал A равным нулю (чисто электрическое поле $E = -\text{grad } V$). В этом случае релятивистское уравнение Шредингера с точностью до поправочного члена с V^2 переходит по своей форме в обыкновенное уравнение Шредингера, решение которого может считаться известным. Именно, положив

$$u = \psi e^{-\frac{iE}{\hbar} t},$$

из (IV.2.10) получим:

$$\Delta\psi + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{(E - V)^2 - E_0^2\} \psi = \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi. \quad (1)$$

В левой части уравнения произведём преобразование

$$\frac{1}{\hbar^2 c^2} \{(E - V)^2 - E_0^2\} = \frac{2E}{\hbar^2 c^2} \left(\frac{E^2 - E_0^2}{2E} - V \right) + \frac{V^2}{\hbar^2 c^2} \quad (1a)$$

и введём следующие обозначения:

$$\frac{E^2 - E_0^2}{2E} = W, \quad \frac{2E}{\hbar^2 c^2} = \frac{2m}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Тогда вместо уравнения (1) получим следующее уравнение:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi = \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi - \frac{V^2}{\hbar^2 c^2} \psi. \quad (3)$$

Слева стоит левая часть обыкновенного нерелятивистского уравнения Шредингера со значениями W и m , определёнными в (2) [на основании (2) m означает просто массовый эквивалент собственного значения $E = mc^2$]. Для того чтобы оценить порядок величины поправочного члена справа, мы в качестве V выберем кулоновский потенциал

$$V = \frac{e^2 Z}{r}.$$

Тогда правая часть будет равна ($\alpha = e^2/\hbar c$)

$$\left[-\alpha Z \gamma_4 \left(\gamma \frac{r}{r} \right) + \alpha^2 Z^2 \right] \frac{\psi}{r^2} \quad (4)$$

и, следовательно, включает члены первого и второго порядка относительно αZ .

Теперь представим искомую функцию в виде ряда, который в частном случае кулоновского поля есть ряд по степеням αZ :

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2 + \dots \quad (5)$$

Подстановка этого ряда в (3) и сравнение величин одинакового порядка в обеих частях равенства дают:

$$\left. \begin{aligned} D\psi_0 &= 0, \\ D\psi_1 &= \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi_0, \\ D\psi_2 &= \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi_1 - \frac{V^2}{\hbar^2 c^2} \psi_0, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где через D обозначен оператор уравнения Шредингера (3). Если мы учтём значения W и m из (2), то этот оператор имеет следующий вид:

$$D = \Delta + \frac{1}{\hbar^2 c^2} (E^2 - 2EV - E_0^2). \quad (6a)$$

Общий член последовательности (6) будет такой же, как третий двухчленный. Очевидно, мы имеем:

$$D\psi_n = \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{grad } V) \psi_{n-1} - \frac{V^2}{\hbar^2 c^2} \psi_{n-2}. \quad (6b)$$

Покажем, что при заданной функции ψ_0 первое приближение ψ_1 может быть выписано сразу. Для этого удобно образовать вспомогательную величину φ , которая должна удовлетворять уравнению, не содержащему величин γ :

$$D\varphi = \frac{1}{\hbar c} \text{grad } V\psi_0. \quad (7)$$

Полагая, далее,

$$\psi_1 = \gamma_4 (\gamma\varphi), \quad (7a)$$

мы, очевидно, удовлетворим второму из уравнений (6). Для решения уравнения (7) сделаем подстановку (a — пока неопределённая постоянная)¹⁾

$$\varphi = a \text{grad } \psi_0 \quad (8)$$

и учтём, что все члены оператора D (6a) перестановочны с операцией градиента, за исключением члена с множителем V ; именно, имеет место равенство

$$D \text{grad } \psi_0 - \text{grad } D\psi_0 = \frac{2E}{\hbar^2 c^2} \text{grad } V\psi_0. \quad (8a)$$

Вследствие первого из уравнений (6) второй член слева равен нулю. Поэтому умножая (8a) на a и принимая во внимание (8), получим:

$$D\varphi = \frac{2Ea}{\hbar^2 c^2} \text{grad } V\psi_0. \quad (8b)$$

Отсюда, сравнивая с (7), имеем:

$$a = \frac{\hbar c}{2E}. \quad (8b)$$

Тем самым оправдан вид подстановки (8) и определена константа a .

Общее решение уравнения (7) получается по известному правилу прибавлением к частному решению (8) неоднородного уравнения общего решения однородного. Последнее решение обозначим через X ; следовательно, должно иметь место

$$DX = 0. \quad (8\gamma)$$

Тогда общее решение (7) пишется в виде:

$$\varphi = \frac{\hbar c}{2E} \text{grad } \psi_0 + X, \quad (8\delta)$$

и на основании (7a) первое приближение ψ_1 будет равно

$$\psi_1 = \frac{\hbar c}{2E} \gamma_4 (\gamma \text{grad } \psi_0) + \gamma_4 (\gamma X). \quad (9)$$

¹⁾ Первоначальное применение этого способа расчёта было более громоздким. См. A. Sommerfeld и A. W. Maue, Ann. d. Phys. 22, 629 (1935). Замечание, что подстановка (8) может быть непосредственно проверена, принадлежит Велькеру. Аналогичный способ см. также в цитированной выше книге Мотта и Мессия.

К сожалению, невозможно столь же простым путём получить следующее приближение ψ_2 . Мы придём к интегральному представлению, которое не может быть больше преобразовано элементарно.

До сих пор собственное значение E в уравнении Дирака (1) предполагалось известным. Это оправдано в случае непрерывного спектра, где величине E можно приписать любое значение, но не оправдано в случае дискретного спектра¹⁾. В последнем случае необходимо наряду с последовательными приближениями для собственной функции проводить также последовательные приближения для собственного значения E аналогично тому, как это было сделано в общей теории возмущений [§ 1, равенство (4a)]:

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \psi_0 + \psi_1 + \psi_2 + \dots \\ E &= \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

В соответствии с этим член, учитывающий энергию в (1), необходимо преобразовать иначе, чем это было сделано в (1a), именно следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{ (E - V)^2 - E_0^2 \} = \\ & = \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{ \varepsilon_0^2 - 2\varepsilon_0 V - E_0^2 + 2(\varepsilon_0 - V)\varepsilon_1 + 2(\varepsilon_0 - V)\varepsilon_2 + \varepsilon_1^2 + V^2 + \dots \}. \end{aligned} \quad (10a)$$

Здесь вертикальными чертами отделены друг от друга те члены, которые необходимо учитывать в нулевом, первом и т. д. приближениях. Таким образом, вместо последовательных уравнений (6) получается:

$$\left. \begin{aligned} D\psi_0 &= 0, \\ D\psi_1 &= \left\{ \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) - \frac{2\varepsilon_1}{\hbar^2 c^2} (\varepsilon_0 - V) \right\} \psi_0, \\ D\psi_2 &= \left\{ \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) - \frac{2\varepsilon_1}{\hbar^2 c^2} (\varepsilon_0 - V) \right\} \psi_1 - \\ & \quad - \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{ 2(\varepsilon_0 - V)\varepsilon_2 + \varepsilon_1^2 + V^2 \} \psi_0, \\ & \dots \dots \dots \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Дифференциальное выражение D , которое, как и ранее, во всех уравнениях одинаково, имеет вид:

$$D = \Delta + \frac{1}{\hbar^2 c^2} (\varepsilon_0^2 - 2\varepsilon_0 V - E_0^2); \quad (11a)$$

число членов в следующих друг за другом уравнениях теперь увеличивается.

Прежде всего покажем, что ε_1 должно равняться нулю. Для доказательства будем исходить из общей теоремы, полученной на стр. 294: для того чтобы каждое из неоднородных уравнений имело непрерывное решение, необходимо, чтобы правые части этих неоднородных уравнений были ортогональны к решениям соответствующего однородного уравнения, в рассматриваемом случае — к функции ψ_0 . В применении ко второму уравнению (11) это даёт:

$$\frac{2\varepsilon_1}{\hbar^2 c^2} \int \psi_0^* (\varepsilon_0 - V) \psi_0 d\tau = \frac{\gamma_4}{\hbar c} \left(\gamma, \int \psi_0^* \text{grad } V \psi_0 d\tau \right). \quad (12)$$

¹⁾ G. Araki, Science Reports of the Tokyo Bunrika Daigaku, 3, № 47—49 (1935).

Правая часть этого равенства равна нулю. Это видно из теоремы импульсов и вытекающего из неё в стационарном случае следствия $\text{grad } V = 0$ [равенство (III.2.17a)], которое равносильно обращению правой части равенства (12) в нуль.

Следовательно, из (12) получаем:

$$\varepsilon_1 \int \psi_0^* (\varepsilon_0 - V) \psi_0 d\tau = 0. \quad (13)$$

Поэтому, действительно,

$$\varepsilon_1 = 0, \quad (13a)$$

поскольку интеграл в (13) не может обратиться в нуль. Больше того, мы покажем, что этот интеграл представляет собой нормировочный интеграл для ψ_0 .

Для этого рассмотрим два решения ψ и ψ' дифференциального уравнения $D=0$, принадлежащие собственным значениям E и E' . Тогда имеем:

$$0 = \psi' \Delta \psi - \psi \Delta \psi' + \frac{2}{\hbar^2 c^2} (E - E') \left(\frac{E + E'}{2} - V \right) \psi \psi' = 0.$$

Интегрируя по координатам и применяя формулу Грина, получим:

$$(E - E') \int \left(\frac{E + E'}{2} - V \right) \psi \psi' d\tau = 0. \quad (14)$$

Следовательно, для случая $E' \neq E$ мы получаем условие ортогональности в форме

$$\int \left(\frac{E + E'}{2} - V \right) \psi \psi' d\tau = 0. \quad (14a)$$

В аналогичной форме следует записать условие нормировки и в случае $E = E'$, $\psi' = \psi^*$. Это даёт:

$$\int (E - V) \psi \psi^* d\tau = \text{const} = E_0. \quad (146)$$

При этом константа определена таким образом, чтобы при переходе к нерелятивистскому уравнению Шредингера ($E/E_0 \rightarrow 1$, $V/E_0 \rightarrow 0$) нормировочный интеграл принял обычный вид:

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1. \quad (14b)$$

Очевидно, что различие между (146) и (14b) проистекает из того, что в дифференциальное выражение D собственное значение E входит квадратично, в то время как в уравнение Шредингера оно входит линейно.

На основании доказанного равенства (13a) система уравнений (11) приобретает более простой вид:

$$\left. \begin{aligned} D\psi_0 &= 0, \\ D\psi_1 &= \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi_0, \\ D\psi_2 &= \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\gamma \text{ grad } V) \psi_1 - \frac{1}{\hbar^2 c^2} [2(\varepsilon_0 - V)\varepsilon_2 + V^2] \psi_0, \\ &\dots \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Второе уравнение совпадает со вторым уравнением системы (6). Отсюда следует, что проведённое раньше вычисление ψ_1 [равенство (9)] справедливо также и для случая дискретного спектра.

Применим снова теорему об ортогональности теперь уже к третьему уравнению (15) (т. е. умножим правую часть на ψ_0^* и проинтегрируем по координатам). Принимая во внимание условие (146) с $E = \epsilon_0$, получим:

$$\frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} \epsilon_2 = \frac{\gamma_4}{\hbar c} \int \psi_0^* (\gamma \text{grad } V) \psi_1 d\tau - \frac{1}{\hbar^2 c^2} \int \psi_0^* V^2 \psi_0 d\tau. \quad (15a)$$

Подставляя ¹⁾ значение ψ_1 из (9) и сокращая множители γ , найдём следующее значение для первого интеграла в (15a):

$$-\frac{1}{2\epsilon_0} \left\{ \int \psi_0^* (\text{grad } V, \text{grad } \psi_0) d\tau + \gamma_{12} \int \psi_0^* \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \psi_0}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} \right) d\tau + \dots \right\}, \quad (15b)$$

причём многоточием обозначены члены, получающиеся из последнего выписанного члена циклической перестановкой. Очевидно, что эти члены должны дать нуль, так как в остальные члены величины γ не входят. Подтвердим это прямым вычислением в интересующем нас специальном случае $\psi_0 = \psi_0^*$ (действительная функция). Множитель при γ_{12} (15b) мы можем при помощи интегрирования по частям преобразовать следующим образом:

$$\int \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \psi_0^2}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial \psi_0^2}{\partial x} \right) d\tau = - \int \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y \partial x} - \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} \right) \frac{\psi_0^2}{2} d\tau = 0.$$

То же самое преобразование приводит первый интеграл (15b) к виду:

$$- \int \Delta V \frac{\psi_0^2}{2} d\tau.$$

Поэтому вместо (15a) можно написать:

$$2E_0 \epsilon_2 = \int \left(\frac{\hbar^2 c^2}{4\epsilon_0} \Delta V - V^2 \right) \psi_0^2 d\tau. \quad (15b)$$

Дальнейшее вычисление ϵ_2 можно провести только, если конкретизировать V (см. ниже). Заметим, что проведённое вычисление второго приближения ϵ_2 собственного значения шло параллельно вычислению первого приближения ψ_1 собственной функции и при этом второе приближение ψ_2 собственной функции не понадобилось для вычислений; то же самое замечание было нами сделано, например, при разборе эффекта Штарка.

Теперь рассмотрим два примера.

А. Формула тонкой структуры в основном состоянии атома водорода. (Для рассмотрения возбуждённых состояний необходимо предыдущие вычисления дополнить учётом вырождения; см. § 9.) Собственную функцию ψ_0 нулевого приближения возьмём в форме Шредингера:

$$\psi_0 = N e^{-\lambda r}. \quad (16)$$

Входящие сюда постоянные N и λ подберём так, чтобы удовлетворялось дифференциальное уравнение $D\psi_0 = 0$ с $V = -Ze^2/r$. Подстановка (16) в (11a) и приравнивание к нулю обоих членов с r^0 и r^{-1} дают для λ два уравнения:

$$\lambda = \sqrt{\frac{E_n^2 - \epsilon^2}{\hbar^2 c^2}} = \frac{\epsilon_0 a Z}{\hbar c}, \quad (16a)$$

¹⁾ Необходимо опять заменить E через ϵ_0 . Член с X надо опустить; см. ниже замечание при (19a).

откуда следует для ε_0 :

$$\varepsilon_0 = E_0(1 + \alpha^2 Z^2)^{-1/2}, \quad (166)$$

Далее, значение постоянной N определяется из нормировочного условия (146), а именно из условия, что

$$4\pi N^2 \int_0^\infty \left(\varepsilon_0 + \frac{Ze^2}{r} \right) e^{-2\alpha r} r^2 dr = E_0.$$

Отсюда легко находим:

$$\pi N^2 = \left(\frac{\alpha Z E_0}{\hbar c} \right)^2 (1 + \alpha^2 Z^2)^{-2}. \quad (16\text{в})$$

Теперь вычислим входящие в (15в) интегралы:

$$\int V^2 \psi_0^2 d\tau = 4\pi N^2 Z^2 e^4 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} dr = \frac{4\pi N^2 Z^2 e^4}{2\lambda},$$

$$\int \Delta V \psi_0^2 d\tau = N^2 \lim_{r \rightarrow 0} \int \Delta V d\tau = N^2 \int \frac{\partial V}{\partial r} d\sigma = 4\pi N^2 Z e^2.$$

Отсюда вместо (15в) получим:

$$2E_0 \varepsilon_2 = 4\pi N^2 Z e^2 \left(\frac{\hbar^2 c^2}{4\varepsilon_0} - \frac{Ze^2}{2\lambda} \right)$$

или, учитывая (16а), (166), (16в),

$$\varepsilon_2 = -\frac{E_0}{2} \frac{(\alpha Z)^4}{(1 + \alpha^2 Z^2)^{3/2}} \sim -\frac{E_0}{2} (\alpha Z)^4. \quad (17)$$

Переход к последнему приближенному равенству соответствует степени точности проводимых вычислений. Именно, поскольку E_0 содержит множитель c^2 , то $E_0(\alpha Z)^4$ будет в смысле зависимости от c малой величиной порядка $(\alpha Z)^2$. Только такой порядок величин при нашем приближении второго порядка мы и можем гарантировать. В том же приближении разложим в ряд ε_0 в равенстве (166):

$$\varepsilon_0 = E_0 \left[1 - \frac{1}{2} (\alpha Z)^2 + \frac{3}{8} (\alpha Z)^4 \right].$$

Если мы учтём, что $\varepsilon_1 = 0$ [равенство (13а)], то, согласно (10), для собственного значения во втором приближении получим:

$$E \sim \varepsilon_0 + \varepsilon_2 = E_0 \left[1 - \frac{1}{2} (\alpha Z)^2 - \frac{1}{8} (\alpha Z)^4 \right]. \quad (18)$$

Это выражение согласуется с формулой тонкой структуры (IV. 7.50), если эту последнюю применить для основного состояния $k = 1$, $n_r = 0$:

$$E = E_0 \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2}, \quad (18\text{а})$$

и правую часть разложить в ряд, ограничившись тремя первыми членами.

Для дальнейшего будет полезно, кроме собственного значения, вычислить этим методом также и собственные функции основного состояния атома водорода (функции «К-оболочки»). Подставляя в (9) значение ψ_0 из (16) и полагая $X = 0$, получим:

$$\psi_1 = N \frac{\hbar c}{2\varepsilon_0} \gamma_4 (\gamma \text{ grad}) e^{-\lambda r}. \quad (19)$$

Если мы для λ возьмём второе равенство, содержащееся в (16а), то увидим, что ψ_1 пропорционально αZ . Именно, мы имеем:

$$\psi_1 = -\frac{1}{2} NaZ \frac{r}{r} e^{-\lambda r}. \quad (19a)$$

Это соотношение является основанием для того, чтобы положить $X=0$. Именно, в пункте Б будет показано, что в общем случае необходимо выбрать X таким образом, чтобы для ψ_1 был обеспечен порядок малости αZ . В рассматриваемом же случае член, выписанный в (19), уже имеет требуемый порядок малости.

Из (16) и (19а) получается выражение для собственной функции в первом приближении в следующем виде:

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 = N \left[1 - \frac{1}{2} \alpha Z \gamma_4 \left(\gamma, \frac{r}{r} \right) \right] e^{-\lambda r}. \quad (20)$$

Нетрудно убедиться, что это выражение в своей радиальной части согласуется с радиальной частью выражения (IV. 8.31), если последнее разложить в ряд по степеням αZ , и что угловая зависимость этого выражения соответствует угловой зависимости выражения (IV. 9.2), если в этом последнем положить $k=1$, $m = \pm \frac{1}{2}$. Для того чтобы совпадение сделать полным, надо в (20) добавить делитель нуля

$$\Gamma \text{ и соответственно } \gamma_{13}\Gamma \text{ с } \Gamma = \frac{1}{4}(1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12}).$$

смотря по тому, какому значению, $m = -\frac{1}{2}$ или $m = +\frac{1}{2}$, соответствует направление спина.

В общем можно сказать: собственные функции обоих K -электронов (противоположно направленные спины, $m = \mp \frac{1}{2}$) в первом приближении, т. е. с точностью до αZ , представляются одним и тем же выражением (20), если только для обоих случаев подходящим образом выбран переводной множитель, а именно следующим образом:

$$\psi_{\mp \frac{1}{2}} = N \left[1 - \frac{1}{2} \gamma_4 \left(\gamma, \frac{r}{r} \right) \right] e^{-\lambda r} \left\{ \begin{matrix} 1 \\ \gamma_{13} \end{matrix} \right\} \Gamma. \quad (21)$$

Б. Собственная функция рассеянной кулоновским полем плоской волны электрона. В то время как в пункте А был рассмотрен пример с дискретным спектром, когда необходимо было одновременно аппроксимировать ψ и E , теперь будет рассмотрен пример с непрерывным спектром, когда E дано и искомой является лишь функция ψ , а именно будет рассмотрено релятивистское уточнение представления (6.1) для плоской, рассеянной кулоновским полем волны. Прежде всего запишем представление (6.1) в обобщённой для произвольного направления k падающей волны форме (II. 9.31):

$$\psi_0 = e^{i(kr)} L_n(\rho), \quad \begin{cases} \rho = i[kr - (kr)], \\ n = \frac{\alpha Z}{i\beta}. \end{cases} \quad (22)$$

Выписанное здесь значение n получается из прежнего значения

$$n = \frac{Z}{ika}, \quad (22a)$$

если в нём положить

$$a = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}, \quad k = \frac{m_0 v}{\hbar} \quad (22б)$$

и понимать под m релятивистскую массу, соответствующую начальной скорости v частицы. В формуле для k это необходимо ввиду смысла соотношения де Бройля, в формуле же для a , в которой стояло m_0 вместо m , это означает некоторое изменение определения, необходимое для нашей цели. Ввиду этого из произведения ka величина m исключается, так что из (22а) сразу получается значение (22) для n .

Введение переменной массы движущегося тела m вместо массы покоя является первым шагом в приспособлении шредингеровской собственной функции к нулевому приближению дираковской собственной функции и соответствует второму равенству (2). Другой шаг состоит в том, что волновое число k определяется через заданное собственное значение E уравнения Дирака следующим образом:

$$k^2 = \frac{E^2 - E_0^2}{\hbar^2 c^2} \quad (22в)$$

в согласии с первым равенством (2). При таком определении значений k и n мы можем представление (22) взять в качестве нулевого приближения для проведения расчёта.

Для перехода к первому приближению необходимо образовать выражение

$$\text{grad } \psi_0 = i e^{i(kr)} \left[k L_n(\rho) + \left(k \frac{r}{r} - k \right) L'_n(\rho) \right].$$

На основании (8д) имеем:

$$\varphi = \frac{i\beta}{2} e^{i(kr)} \left[\frac{k}{k} L_n(\rho) + \left(\frac{r}{r} - \frac{k}{k} \right) L'_n(\rho) \right] + X. \quad (23)$$

Множитель β в последнем выражении появился ввиду того, что было учтено соотношение де Бройля и соотношение между массой и энергией

$$\frac{\hbar c k}{E} = \frac{c m v}{m c^2} = \beta. \quad (23а)$$

В (23) имеется ещё неизвестная вектор-функция X . Для того чтобы её определить, используем разложение (II.7.28) для L :

$$\left. \begin{aligned} L(\rho) &= 1 - \frac{n}{1} \frac{\rho}{1!} + \frac{n(n-1)}{1 \cdot 2} \frac{\rho^2}{2!} \dots, \\ L'(\rho) &= -n \left(1 - \frac{n-1}{2} \frac{\rho}{1!} + \frac{(n-1)(n-2)}{2 \cdot 3} \frac{\rho^2}{2!} \dots \right). \end{aligned} \right\} \quad (23б)$$

Из этих последних равенств следует, что член в правой части равенства (23), связанный с $L'_n(\rho)$, имеет порядок

$$i\beta n = \alpha Z \dots, \quad [\text{см. (22)}],$$

как это и требуется для первого приближения. Член же правой части равенства (22), связанный с $L_n(\rho)$, имеет порядок $i\beta \cdot 1$, что противоречит требованию о порядке малости первого приближения. Это противоречие может быть устранено тем, что функция X полагается равной этому члену с обратным знаком, что допустимо, так как этот член пропорционален ψ_0 , и поэтому требование $DX = 0$ удовлетворено.

Следовательно, теперь в более определённой форме имеем:

$$\varphi = \frac{i\beta}{2} e^{i(kr)} \left(\frac{r}{r} - \frac{k}{k} \right) L'_n(\rho). \quad (23в)$$

Это можно также записать в зависимости от значения ρ : или

$$\varphi = \frac{\beta}{2k} e^{i(kr)} \text{grad } L_n(\rho), \quad (23г)$$

или

$$\varphi = -\frac{\beta}{2r} e^{i(kr)} \frac{\partial}{\partial k} L_n(\rho). \quad (23д)$$

Следовательно, на основании (7а) ψ_1 и $\psi = \psi_0 + \psi_1$ найдены в простой компактной форме¹⁾. В зависимости от того, используем ли мы (23г) или (23д), для ψ получим следующие выражения:

$$\psi = e^{i(kr)} \left[1 + \frac{\beta}{2k} \gamma_4 (\gamma \text{ grad}) \right] L_n(\rho) \Gamma \quad (24)$$

или

$$\psi = e^{i(kr)} \left\{ 1 - \frac{\beta}{2r} \gamma_4 \left(\gamma \frac{\partial}{\partial k} \right) \right\} L_n(\rho) \Gamma. \quad (24а)$$

В правые части (24) и (24а) нами добавлен не зависящий от координат множитель Γ . Это связано со следующим обстоятельством. Мы требуем, чтобы решение ψ удовлетворяло в первом приближении не только квадратированному, но также и линейному уравнению Дирака. Следовательно, вопрос заключается в том, чтобы из множества решений квадратированного уравнения Дирака выделить решения линейного уравнения Дирака.

Общий путь для этого мог бы быть следующим: напишем квадратированное уравнение Дирака в форме

$$D_+ D_- \psi = 0, \quad (24б)$$

где D_{\pm} является линейным оператором Дирака:

$$D_{\pm} = (\gamma \text{ grad}) \pm \frac{1}{\hbar c} E_0 - \frac{1}{\hbar c} \gamma_4 (E - V).$$

Очевидно, функция

$$\Psi = D_- \psi \quad (24в)$$

удовлетворяет линейному уравнению Дирака

$$D_+ \Psi = 0.$$

Следовательно, для того чтобы получить решение линейного уравнения Дирака, необходимо лишь к решению ψ квадратированного уравнения Дирака применить операцию D_- .

Однако той же самой цели достигают более простым путём: нам известно, что решение ψ_0 [равенство (22)] на бесконечности переходит в плоскую волну с направлением распространения k (рассеянная волна, учитываемая множителем L , на бесконечности исчезает). Такое поведение решения не будет нарушено благодаря присутствию ψ_1 в (24) [это можно показать детально, пользуясь асимптотическим представлением для $L'(\rho)$]. Вследствие

¹⁾ То же самое или эквивалентное компактное представление было найдено, хотя и более громоздким путём — суммированием шаровых функций — в работах: O. Scherzer, Ann. d. Phys. 13, 137 (1932); J. Meixner, Zs. f. Phys. 90, 312 (1934); W. H. Furry, Phys. Rev. 46, 39 (1934).

этого (24) на бесконечности представляется в виде:

$$\psi = e^{i(kr)}\Gamma. \quad (24г)$$

Для достаточно больших расстояний от ядра ($V \rightarrow 0$) линейное уравнение Дирака переписывается в следующем виде:

$$D_+\psi = \left\{ (\gamma \text{ grad}) - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0) \right\} \psi = 0.$$

Это уравнение удовлетворяется функцией (24г), если будет выполнено условие

$$\left\{ l(\gamma k) - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0) \right\} \Gamma = 0. \quad (25)$$

Отсюда, как и в гл. IV, § 4 определяется Γ . Учитывая закон сохранения энергии, получим:

$$\Gamma = \left\{ l(\gamma k) - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E + E_0) \right\} \Gamma_0, \quad (25а)$$

где Γ_0 произвольно, например может быть выбрано равным обычному переводному множителю $\frac{1}{4}(1 + \gamma_4)(1 + l\gamma_{12})$. При таком выборе Γ выражение (24) удовлетворяет уравнению Дирака на бесконечности. На основании принципа аналитического продолжения то же самое заключение справедливо и для конечных расстояний.

Мы дополним решение (24) указанием сопряжённого выражения. На основании общего правила из главы IV, § 3, стр. 196 (замена l, γ, γ_4 на $-l, -\gamma, \gamma_4$ и изменение порядка следования всех γ -единиц, в результате обеих операций величина $\gamma_4 \gamma$ остаётся без изменения) из (24) получается

$$\bar{\psi} = \bar{\Gamma} e^{-i(kr)} \left\{ 1 + \frac{\beta}{2k} \gamma_4 (\gamma \text{ grad}) \right\} L^* \quad (26)$$

и из (24а)

$$\bar{\psi} = \bar{\Gamma} e^{-i(kr)} \left\{ 1 - \frac{\beta}{2r} \gamma_4 \left(\gamma \frac{\partial}{\partial k} \right) \right\} L^*. \quad (26а)$$

Здесь $L^* = L_{-n}(-\rho)$, так как $-n, -\rho$ являются сопряжёнными величинами к чисто мнимым величинам n, ρ ; величина же $\bar{\Gamma}$ на основании (25) удовлетворяет условию

$$\bar{\Gamma} \left\{ l(\gamma k) - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0) \right\} = 0. \quad (27)$$

Заметим в заключение, что рассмотренный способ вычисления ни в коем случае не ограничен применением к кулоновскому полю. Действительно, в начале данного параграфа потенциал V предполагался совершенно произвольным и был конкретизирован в виде кулоновского потенциала лишь в рассмотренных примерах А и В. Пусть, например, дело идёт о рассеянии плоской волны на произвольном поле V и известно решение уравнения Шредингера этой задачи в форме

$$\psi_0 = e^{i(kr)} \Delta(x, y, z), \quad (28)$$

где Δ содержит рассеянную волну, накладывающуюся на плоскую волну. Тогда из соответствующим образом обобщённого равенства (23) непосредственно видно, что дополнительное решение X должно и теперь компенси-

ровать первый член (23):

$$\frac{i\beta}{2} e^{i(kr)} \frac{k}{k} \Delta(x, y, z).$$

Таким образом, в качестве обобщённой формы решения (24) получается выражение¹⁾

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 = e^{i(kr)} \left\{ 1 + \frac{\beta}{2k} \gamma_4 (\gamma \text{grad}) \right\} \Delta(x, y, z) \Gamma. \quad (29)$$

В. Формула Резерфорда с поправкой на спин. Учтывая (24) и (26), мы получим следующее выражение для плотности частиц в ψ -состоянии:

$$\bar{\psi} \gamma_4 \psi = \bar{\Gamma} (L^* + \gamma_4 q^*) \gamma_4 (L + \gamma_4 q) \Gamma. \quad (30)$$

В этом выражении введены обозначения:

$$q = \frac{\beta}{2k} (\gamma \text{grad } L), \quad q^* = \frac{\beta}{2k} (\gamma \text{grad } L^*). \quad (30a)$$

Раскроем скобки в выражении (30):

$$\bar{\psi} \gamma_4 \psi = \bar{\Gamma} \gamma_4 \Gamma L^* L - \bar{\Gamma} q^* \Gamma L + \bar{\Gamma} q \Gamma L^* + \bar{\Gamma} \gamma_4 q^* q \Gamma. \quad (31)$$

В оба средних члена справа входит произведение $\bar{\Gamma} \gamma_4 \Gamma$, которое на основании (IV. 5.47 и 49) может быть сведено к $\Gamma_0 = \bar{\Gamma} \gamma_4 \Gamma$.

Вследствие этого мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Gamma} q \Gamma &= -\frac{i\beta^2}{2k^2} (k \text{ grad } L) \Gamma_0, \\ \bar{\Gamma} q^* \Gamma &= -\frac{i\beta^2}{2k^2} (k \text{ grad } L^*) \Gamma_0. \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Для того чтобы преобразовать третий член справа в (31), заметим, что произведение $q q^*$ содержит три члена с одинаковыми двумя компонентами γ , входящими в этот член, и три члена с двумя различными компонентами. Члены с одинаковыми компонентами γ дают величину

$$\frac{\beta^2}{4k^2} (\text{grad } L, \text{ grad } L^*) \Gamma_0. \quad (33)$$

Члены же с различными компонентами дают нуль, что видно сразу, если учесть, что стоящее при них множителем выражение является соответствующей компонентой векторного произведения

$$[\text{grad } L, \text{ grad } L^*],$$

которое равно нулю вследствие того, что $\text{grad } L$ и $\text{grad } L^*$ являются коллинеарными векторами.

Вследствие (32) и (33) выражение (31) получает форму, не зависящую от величин γ (отвлекаясь от нормировочного множителя):

$$\bar{\psi} \gamma_4 \psi = \left\{ LL^* + \frac{i\beta^2}{2k^2} [L (k \text{ grad } L^*) - L^* (k \text{ grad } L) - \frac{1}{2} (\text{grad } L, \text{ grad } L^*)] \right\} \Gamma_0. \quad (34)$$

¹⁾ J. Meixner, Ann. d. Phys. 29, 97 (1937).

Далее, учитывая значение аргумента ρ в L в (22), найдём, что

$$\begin{aligned} (k \operatorname{grad} L) &= -\frac{k}{r} \rho L', & (k \operatorname{grad} L^*) &= +\frac{k}{r} \rho L'^*, \\ (\operatorname{grad} L, \operatorname{grad} L^*) &= -\frac{2ik}{r} \rho L' L'^* \end{aligned}$$

и поэтому

$$\bar{\psi} \gamma_4 \psi = LL^* + \frac{i\beta^2 \rho}{2kr} [LL'^* + L^* L' - L' L'^*]. \quad (34a)$$

Это выражение¹⁾ справедливо для любых расстояний r от ядра. Нас же интересует главным образом его асимптотическое поведение при больших r (и соответственно ρ). Поэтому мы должны обратиться к асимптотической формуле (II. 9.25a). Эта формула, если мы пренебрежём при дифференцировании членами с $(1/\rho)^2$, даёт:

$$\left. \begin{aligned} L &= a - \frac{n}{\rho} e^{\rho a^*}, & L^* &= a^* - \frac{n}{\rho} e^{-\rho a}, \\ L' &= \frac{n}{\rho} (a - e^{\rho a^*}), & L'^* &= -\frac{n}{\rho} (a^* - e^{-\rho a}), \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

где введены обозначения:

$$a = \frac{(-n)^n}{\Gamma(1+n)}, \quad a^* = \frac{(+n)^{-n}}{\Gamma(1-n)}. \quad (35a)$$

В равенствах (35) первые члены справа соответствуют падающей плоской волне, вторые члены — рассеянной волне. Ту часть (34a), которую дают первые члены, обозначим через J_0 ; часть, даваемую вторыми членами, — через J . Далее, при вычислении (34a) получаются ещё члены со смешанными произведениями, соответствующие интерференции волн обоих типов. Эти члены, как несущественные для рассматриваемой задачи, мы отбросим. Таким образом, получаем:

$$J_0 = aa^* (1 + \dots) \Gamma_0, \quad J = aa^* \left(\frac{n^2}{\rho^2} + \frac{i\beta^2 \rho}{2kr} \frac{n^2}{\rho^2} \right) \Gamma_0.$$

Отсюда, пренебрегая членами, исчезающими при $\rho \rightarrow \infty$ и обозначенными многоточием, находим:

$$\frac{J}{J_0} = \frac{n^2}{\rho^2} \left(1 + \frac{i\beta^2 \rho}{2kr} \right). \quad (36)$$

На основании (22) имеем:

$$\frac{i\rho}{kr} = - \left[1 - \frac{(kr)}{kr} \right] = -(1 - \cos \theta) = -2 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (36a)$$

где через θ , как и раньше, обозначен угол рассеяния (т. е. угол между направлением распространения падающей волны k и направлением к точке наблюдения r). Отсюда, учитывая значение n в (22), получаем:

$$\frac{n^2}{\rho^2} = \left(\frac{\alpha Z}{2kr \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2 = \left(\frac{e^2 Z}{2m v^2} \right)^2 \frac{1}{r^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{e^2 Z}{2m_0 v^2} \right)^2 \frac{1 - \beta^2}{r^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (36b)$$

При учёте (36a) и (36b) из (36) следует выражение дифференциального попе-

¹⁾ Именно, при условии, что это выражение имеет первый порядок относительно αZ и, следовательно, при пренебрежении последним членом второго порядка $L' L'^*$. Это справедливо для больших расстояний от ядра, как это будет показано в п. 3. на стр. 351, но для конечных расстояний от ядра не может быть гарантировано.

речного сечения dQ рассматриваемого процесса рассеяния:

$$dQ = \frac{r^2 J}{J_0} d\Omega = \left(\frac{e^2 Z}{2m_0 v^2} \right)^2 \frac{(1 - \beta^2) \left(1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega. \quad (37)$$

Эта формула при малых скоростях ($\beta \rightarrow 0$) переходит в формулу Резерфорда (64а) с той разницей, что там рассматривалось рассеяние α -частиц и заряд и масса рассеиваемой частицы обозначались через E и M , здесь же рассмотрено рассеяние электронов с зарядом e и массой m (уравнение Дирака для α -частиц не годится). Формула (37) была впервые выведена Моттом¹⁾.

В заключение сделаем некоторые методические замечания.

1. Общепринято и естественно с точки зрения приближения Борна произведение $2mv^2$ в формуле Резерфорда сокращённо обозначать через $4T$ (T — кинетическая энергия). Мы этого не сделали для того, чтобы подчеркнуть то обстоятельство, что в релятивистском обобщении (37) формулы Резерфорда у нас вместо величины $2m_0 v^2 = 4T$ появляется не учетверённая величина релятивистского обобщения выражения кинетической энергии, а величина

$$2mv^2 = \frac{2m_0 v^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

2. В то время как обычная формула Резерфорда имеет одинаковый вид как при выводе её на основании классической механики (путь движения частицы в кулоновском поле), так и при выводе её на основании волновой механики (см. § 6) формула (37) отличается от той, которая получилась бы при выводе на основании релятивистской теории движения частицы в соответствующем поле. Причина этого лежит в следующем: в релятивистской механике расчёт ведётся при $\hbar = 0$ или, то же самое, при $\alpha Z \rightarrow \infty$. Это есть условие, обратное тому, при котором проведено наше вычисление (разложение в ряд по степени αZ).

3. Проведённое вычисление кажется несколько непоследовательным в том отношении, что собственные функции ψ нам известны лишь в первом приближении, т. е. с точностью до величин порядка αZ , и тем не менее в равенстве (36) мы сохранили член с $n^2 \beta^2$, который на основании (22) является величиной порядка $(\alpha Z)^2$. Сохранение этого члена может быть обосновано следующим образом. Если мы в разложении для ψ сохраним члены до второго порядка включительно

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \psi_2,$$

то в выражении (30) в качестве членов второго порядка малости войдут следующие члены:

$$а) \bar{\psi}_1 \psi_1; \quad б) \bar{\psi}_0 \psi_2 \quad \text{и} \quad \bar{\psi}_2 \psi_0.$$

Член а) имеет порядок $(\alpha Z)^2$, так как ψ_1 и поэтому $\bar{\psi}_1$ имеют порядок αZ . Далее, по предположению, ψ_2 и $\bar{\psi}_2$ имеют порядок $(\alpha Z)^2$. Но стоящие при них в б) множители ψ_0 и $\bar{\psi}_0$ являются во всяком случае малыми величинами, так как при вычислении J нами сохранена лишь та часть ψ_0 , которая пропор-

¹⁾ N. E. Mott, Proc. Roy. Soc. 124, 425 (1929). См. также F. Sauter, Zs. f. Phys. 86, 818 (1933). Вывод, приведённый в тексте, хотя, вероятно, не проще того, который был дан Заутером, однако является более близким нашему пути изложения. В то же время этот метод является и более полным, так как он включает случай, когда точка наблюдения находится на конечном расстоянии от ядра, в то время как Заутер, исходящий из борновского приближения, с самого начала ограничил себя бесконечно удалённой точкой наблюдения.

циональна n [соответственно вторым членам справа в L , L^* равенства (35)]. Поэтому члены б) имеют порядок

$$n(\alpha Z)^2 \sim \frac{(\alpha Z)^2}{\beta}.$$

Вследствие этого¹⁾ члены б) имеют более высокий порядок малости по αZ , чем член а). Поэтому последний член мы при вычислении J сохранили, а предыдущие члены могли отбросить, не делая ошибки.

4. При рассеянии друг на друге одинаковых частиц (например, протон на протоне, α -частицы на ядре He) на сцену выступают совершенно новые условия (обменный эффект), которые мы сможем рассмотреть лишь в гл. IX, § 8.

§ 9. АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА

Исторически открытие спина и последовавшее за ним открытие уравнения Дирака берут своё начало в аномальном эффекте Зеемана. Здесь мы поставим себе обратную задачу: вывести законы аномального эффекта Зеемана из уравнения Дирака. Так как мы с помощью уравнения Дирака умеем решать лишь задачу одного электрона, то ограничимся эффектом Зеемана для дублетов щелочных элементов и водорода. При этом мы будем исходить не из линейного уравнения Дирака, как это сделал Дарвин, первый рассмотревший эту задачу²⁾, а из квадрированного уравнения. Для этой цели необходимо несколько развить результаты предыдущего параграфа на случай наличия вектор-потенциала

$$A = \frac{1}{2} H(-y, x, 0). \quad (1)$$

В этом случае уравнение (1) предыдущего параграфа принимает вид [см. также уравнения (IV.2.10 и 14)]:

$$\begin{aligned} \Delta\psi + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{(E - V)^2 - e^2 A^2 - E_0^2\} \psi = \\ = \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\boldsymbol{\gamma} \text{ grad } V) \psi + \frac{2ie}{\hbar c} (A \text{ grad } \psi) - \frac{e}{\hbar c} (\boldsymbol{\sigma} H) \psi. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь величина $\boldsymbol{\sigma}$ означает вектор спина $-i(\gamma_{23}, \gamma_{31}, \gamma_{12})$; член с $(A \text{ grad } \psi)$ перенесён вправо для того, чтобы подчеркнуть, что при дальнейшем вычислении он, как и поправка на спин, будет рассматриваться как возмущение.

Как и в (8.10) разложим ψ и E по степеням α (теперь в качестве параметра разложения вместо αZ берётся α , потому что не только у водорода, но и у щелочных элементов вследствие экранирования электронным облаком величина Z приблизительно равна единице с точностью до поправки, учитывающей влияние электронного облака). Вместо (8.11) находим уравнения:

$$D'\psi_0 = 0, \quad D = \Delta + \frac{1}{\hbar^2 c^2} (\epsilon_0^2 - 2\epsilon_0 V - E_0^2), \quad (3)$$

$$D'\psi_1 = \left\{ \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\boldsymbol{\gamma} \text{ grad } V) - \frac{2\epsilon_1}{\hbar^2 c^2} (\epsilon_0 - V) \right\} \psi_0, \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} D'\psi_2 = \left\{ \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\boldsymbol{\gamma} \text{ grad } V) - \frac{2\epsilon_1}{\hbar^2 c^2} (\epsilon_0 - V) \right\} \psi_1 + \\ + \frac{e}{\hbar c} \{2i(A \text{ grad}) - (\boldsymbol{\sigma} H)\} \psi_0 - \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{2(\epsilon_0 - V)\epsilon_2 + \epsilon_1^2 + V^2\} \psi_0. \end{aligned} \quad (3b)$$

¹⁾ Если β существенно меньше единицы, то эти оценки не годятся. Но в этом случае нет необходимости применять уравнение Дирака.

²⁾ C. G. Darwin, Proc. Roy. Soc. 118, 676 (1928).

Относительно этих уравнений заметим следующее. Первый член справа в уравнении (2), как это показано на стр. 349, имеет первый порядок малости по α ; поэтому этот член появляется в уравнении (3а) умноженным на ψ_0 , а в (3б) — на ψ_1 . Второй и третий члены справа в (2) рассматриваются как поправки второго порядка по α (см. ниже); поэтому оба эти члена появляются лишь в уравнении (3б). Член с A^2 в левой части уравнения (2) рассматривается как поправка четвертого порядка и в расчёт в рассматриваемом приближении не берётся, член же с V^2 , как и раньше (стр. 349), имеет второй порядок малости по α и поэтому учитывается в уравнении (3б).

Для оценки порядка величин, связанных с магнитным полем [члены с H , A и A^2 в (2)], надо учесть следующее: в случае эффекта Зеемана для нас существенны такие поля H , при которых магнитная энергия возмущения $h \Delta v_H$ сравнима с энергией расщепления тонкой структуры $h \Delta v$. Порядок величины магнитной энергии возмущения получается из нормального эффекта Зеемана [равенство (11.6.13б)]; порядок энергии расщепления тонкой структуры в случае атома водорода получается в виде энергии возмущения ε_2 из равенства (8.17). Таким образом, находим:

$$h \Delta v_H = \frac{e}{m_0} \frac{\hbar}{2c} H, \quad (4)$$

$$h \Delta v = \frac{1}{2} \alpha^4 E_0 = \alpha^2 R h, \quad (4a)$$

где m_0 — масса покоя электрона, $R h = \frac{1}{2} \alpha^2 E_0$ — энергия Ридберга. Положив $\Delta v_H \sim \Delta v$, из (4) и (4а) получим:

$$\left. \begin{aligned} H &\sim \frac{m_0}{e} \frac{2c}{\hbar} \alpha^2 R h, \\ \frac{e}{\hbar c} H &\sim \frac{2m_0}{\hbar^2} \alpha^2 R h = \frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} \alpha^2 R h. \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

Тем самым нами получен порядок величины магнитной поправки на спин (последний член справа в (2)). Тот же порядок величины имеют члены в правой части (3б), которые стоят множителями у ψ_0 , как, например:

$$\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_2}{\hbar^2 c^2} \sim \frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} \alpha^2 R h,$$

где вместо ε_0 подставлено его приближённое значение E_0 , а вместо ε_2 — правая часть (4а). Этих замечаний достаточно для обоснования использованных выше оценок порядка различных величин.

Теперь рассмотрим последовательно уравнения (3), (3а), (3б).

Уравнение (3) является уравнением типа Шредингера; его собственные функции и собственные значения могут считаться известными на основании приведённых в (8.2) соотношений. Члены, зависящие от магнитного поля, в это уравнение не входят; однако мы должны принять во внимание «магнитное» вырождение и поэтому существенно дополнить соображения предыдущего параграфа. Пусть p будет кратность вырождения собственного значения ε_0 , т. е. пусть имеется p различных собственных функций, принадлежащих одному и тому же собственному значению ε_0 . Эти различные собственные функции будут нумероваться верхним индексом $\mu = 1, 2, \dots, p$. Следовательно, общее решение уравнения (3) запишется в форме

$$\psi_0 = \sum_{\mu=1}^p a_{\mu} \psi_{\mu}^{\varepsilon_0}. \quad (5)$$

Функции ψ^μ как решения уравнения Шредингера не зависят от величин γ . Эти функции мы считаем ортогонализированными и нормированными на основании (8.14а, б) следующим образом:

$$\int \psi^{*\nu} (\epsilon_\nu - V) \psi^\mu d\tau = \delta_{\mu\nu} E_0. \quad (5a)$$

Снятие этого вырождения при помощи магнитного поля и спина образует основу эффекта Зеемана.

Перейдем к уравнению (3а). Для разрешимости этого уравнения необходимо, чтобы его правая часть была ортогональна ко всем решениям однородного уравнения $D = 0$. Первый член справа автоматически удовлетворяет этому условию. Действительно, умножим его на $\psi^{*\nu}$ и воспользуемся для ψ_0 представлением (5). Тогда, изменив порядок интегрирования и суммирования, мы получим члены вида:

$$\int \psi^{*\nu} \text{grad } V \psi^\mu d\tau. \quad (6)$$

Но при рассмотрении равенства (8.12) мы видели, что интегралы такого вида обращаются в нуль (приведенное там доказательство, относившееся к случаю $\mu = \nu$, справедливо и в общем случае, так как оно основывается на теореме импульсов).

Вследствие этого требование ортогональности должно быть применено лишь ко второму члену правой части уравнения (3а) и гласит:

$$\frac{2\epsilon_1}{\hbar^2 c^2} \int \psi^{*\nu} (\epsilon_0 - V) \sum a_\mu \psi^\mu d\tau = 0,$$

что на основании (5а) эквивалентно условию

$$\frac{2\epsilon_1}{\hbar^2} a_\mu E_0 = 0.$$

Учитывая, что все a_μ не могут быть равны нулю, заключаем, что

$$\epsilon_1 = 0. \quad (6a)$$

как и в (8.13а). Вследствие этого уравнение (3а) оказывается эквивалентным с уравнением для ψ_1 предыдущего параграфа, которое было уже проинтегрировано. Вследствие (8.9) решение уравнения (3а) имеет вид:

$$\psi_1 = \frac{\hbar c}{2\epsilon_0} \gamma_4 \left(\gamma, \text{grad } \sum a_\mu \psi^\mu \right). \quad (6б)$$

Дополнительный член X из (8.9) может быть здесь опущен по тем же причинам, как и в § 8, А.

Вследствие (6а, б) первый член правой части уравнения (3б) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\epsilon_0} (\gamma, \text{grad } V) \left(\gamma, \text{grad } \sum a_\mu \psi^\mu \right) = \\ & = -\frac{1}{2\epsilon_0} \left(\text{grad } V, \text{grad } \sum a_\mu \psi^\mu \right) - \frac{i}{2\epsilon_0} \left(\sigma, \left[\text{grad } V, \text{grad } \sum a_\mu \psi^\mu \right] \right). \end{aligned}$$

При этих преобразованиях у нас не только выпала гиперкомплексная единица γ_4 , но и единицы $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ объединились в чистый вектор спина σ . Вследствие того что остальные члены уравнения (3б) содержат γ лишь в виде σ , мы заключаем, что в этом уравнении мы имеем дело с кватер-

нионной группой

$$1, \sigma \quad (7)$$

и на величины a_μ следует смотреть как на гиперкомплексные числа этой группы.

Собирая члены с множителями 1 и σ и учитывая (6а), мы можем уравнению (3б) придать следующую компактную форму:

$$D\psi_2 = \{\Pi + (\sigma P)\} \sum a_\mu \psi^\mu, \quad (8)$$

где Π и P являются операторами, не зависящими от τ и имеющими скалярный и соответственно векторный характер, а именно:

$$\Pi = -\frac{1}{2\epsilon_0} (\text{grad } V, \text{grad}) + \frac{2ie}{\hbar c} (A, \text{grad}) - \frac{2(\epsilon_0 - V)\epsilon_2 + V^2}{\hbar^2 c}, \quad (8a)$$

$$P = -\frac{i}{2\epsilon_0} [\text{grad } V, \text{grad}] - \frac{e}{\hbar c} H. \quad (8б)$$

Применим теперь теорему об ортогональности к уравнению (8). Для того чтобы (8) было разрешимо, необходимо, чтобы правая часть этого уравнения после умножения на ψ^{*m} и интегрирования обращалась в нуль для каждого значения m . Полагая

$$Q_{\mu m} = \int \psi^{*m} \Pi \psi^\mu d\tau, \quad (8в)$$

$$J_{\mu m} = \int \psi^{*m} \psi^\mu d\tau, \quad (8г)$$

$$D_{\mu m} = -\frac{i}{2\epsilon_0} \int \psi^{*m} [\text{grad } V, \text{grad } \psi^\mu] d\tau, \quad (8д)$$

получим следующую систему условий:

$$\sum_\mu \{Q_{\mu m} + [\sigma, D_{\mu m} - \frac{e}{\hbar c} H J_{\mu m}]\} a_\mu = 0. \quad (9)$$

Это есть система из p уравнений ($m = 1, 2, \dots, p$) для p неизвестных a_μ ($\mu = 1, 2, \dots, p$).

Так как величины a_μ должны принадлежать к кватернионной группе (7), они должны быть четырёхкомпонентными; однако можно эти величины свести к двухкомпонентным, введя делитель нуля кватернионной группы, например введя справа в (9) множитель $1 - \sigma_3 = 1 + i\gamma_{12}$. Следовательно, если мы положим

$$a_\mu = (b + b_1\sigma_1 + b_2\sigma_2 + b_3\sigma_3)(1 - \sigma_3), \quad (10)$$

то легко найдём, что

$$a_\mu = (x_\mu + \sigma_1 y_\mu)(1 - \sigma_3), \quad \left\{ \begin{array}{l} x_\mu = b - b_3, \\ y_\mu = b_1 - ib_2 \end{array} \right. \quad (10a)$$

и отсюда

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_1 a_\mu = (y_\mu + \sigma_1 x_\mu)(1 - \sigma_3), \\ \sigma_2 a_\mu = i(y_\mu - \sigma_1 x_\mu)(1 - \sigma_3), \\ \sigma_3 a_\mu = (-x_\mu + \sigma_1 y_\mu)(1 - \sigma_3). \end{array} \right\} \quad (10б)$$

Эти формулы будут нами использованы для решения системы уравнений (9). Если мы положим

$$H = H_z = H, \quad D_{\mu m} = i(X, Y, Z)_{\mu m} \quad (10b)$$

и приравняем отдельно множители при 1 и σ_1 нулю, то получим систему $2p$ уравнений для $2p$ неизвестных $x_\mu y_\mu$, не содержащую γ -величин:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\mu} \left(Q_{\mu m} - iZ_{\mu m} + \frac{e}{\hbar c} H J_{\mu m} \right) x_{\mu} - i(X_{\mu m} + iY_{\mu m}) y_{\mu} &= 0, \\ \sum_{\mu} -i(X_{\mu m} - iY_{\mu m}) x_{\mu} + \left(Q_{\mu m} + iZ_{\mu m} - \frac{e}{\hbar c} H J_{\mu m} \right) y_{\mu} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Покажем, что коэффициенты этой системы уравнений имеют «диагональный или приблизительно диагональный характер», т. е. что имеют место равенства:

$$\left. \begin{aligned} J_{\mu m} &= J \delta_{\mu m}, \quad Q_{\mu m} = Q \delta_{\mu m}, \quad Z_{\mu m} = Z \delta_{\mu m}, \\ (X \pm iY)_{\mu m} &= K \delta_{\mu \pm 1, m}. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Это утверждение автоматически следует из рассмотрения зависимости собственных функций атома водорода от угла φ :

$$\psi^{\mu} = R P_l^{\mu}(\cos \vartheta) e^{i\mu\varphi}. \quad (13)$$

Например, из (82) сразу получается:

$$\begin{aligned} J_{\mu m} &= 0 \quad \text{для } \mu \neq m, \\ J_{\mu m} &= J = \int |\psi^m|^2 d\tau \quad \text{для } \mu = m. \end{aligned} \quad (13a)$$

В (8b) необходимо учесть вид оператора Π ; V зависит только от r и поэтому $(\text{grad } V, \text{grad}) = \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r}$; на основании (1) A равно A_{φ} , поэтому $(A \text{ grad}) \psi^{\mu} = \frac{H}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi^{\mu} = i\mu \frac{H}{2} \psi^{\mu}$. Отсюда следует утверждение относительно $Q_{\mu m}$, содержащееся в (12), и значение Q , при учёте нормировочного условия (5a) равное

$$Q = -\frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} \left(\epsilon_3 + \frac{\hbar c}{2E_0} e m H J + A \right), \quad (14)$$

где через A обозначена величина, не зависящая от магнитного поля:

$$A = \frac{1}{2E_0} \int V^2 |\psi^m|^2 d\tau + \frac{\hbar^2 c^2}{8\epsilon_0 E_0} \int \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} |\psi^m|^2 d\tau. \quad (14a)$$

Значение Z получается из (8d) и (10b):

$$Z_{\mu m} = -\frac{1}{2\epsilon_0} \int \psi^{*m} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi^{\mu} d\tau.$$

Отсюда непосредственно следует утверждение относительно $Z_{\mu m}$, содержащееся в (12), и значение Z :

$$Z = -\frac{im}{2\epsilon_0} \int \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} |\psi^m|^2 d\tau.$$

Последнее выражение запишем в другом виде:

$$Z = -im \frac{2E_0}{\hbar^2 c^2} B, \quad B = \frac{\hbar^2 c^2}{4e_0 E_0} \int \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} |\psi^m|^2 d\tau. \quad (15)$$

Вычисление величин $(X \pm iY)_{\mu m}$ более громоздко, так как оно требует применения некоторых соотношений из теории сферических функций. Величина K в (12) равна (см. примечание на стр. 371)

$$K = \frac{2iE_0}{\hbar^2 c^2} W_{m \mp \frac{1}{2}} B, \quad W_{m \mp \frac{1}{2}} = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(m \mp \frac{1}{2}\right)^2}. \quad (16)$$

Наконец покажем ещё, что интеграл J из равенства (13а) равен приблизительно единице. На основании точного условия нормировки, условия (5а) для $\nu = \mu$, имеет место равенство:

$$\frac{E_0}{e_0} = \int |\psi^\mu|^2 \left(1 - \frac{V}{e_0}\right) d\tau. \quad (17)$$

Левая сторона этого равенства отличается от единицы на члены порядка α^2 ; интеграл в правой части равенства, содержащий V , по порядку величины определяется областью интегрирования внутри сферы радиуса атома водорода $r = \hbar^2/m_0 e^2$; поэтому находим, что этот интеграл с $\frac{V}{e_0}$ имеет порядок α^2 . Пренебрегая поправками этого порядка, из (13а) и (17) заключаем, что

$$J \sim 1. \quad (17а)$$

Внесём выражения (12)—(17а) в (11), причём учтём, что благодаря наличию δ -символа в суммах по μ сохранится только один член; при соответствующем объединении слагаемых и сокращении на общий множитель получим:

$$\left. \begin{aligned} \left(\varepsilon_2 + \frac{\hbar c}{2E_0} (m-1) eH + A + mB\right) x_m - W_{m-\frac{1}{2}} B y_{m-1} &= 0, \\ -W_{m+\frac{1}{2}} B x_{m+1} + \left(\varepsilon_2 + \frac{\hbar c}{2E_0} (m+1) eH + A - mB\right) y_m &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Тем самым в основном цель достигнута; в дальнейшем необходимо лишь обсудить эту систему.

Число m , так же как и μ , определено выражением (13) как магнитное квантовое число уравнения Шредингера; так как m изменяется от $-l$ до $+l$, то кратность вырождения, обозначенная нами через p и ранее бывшая неизвестной, оказывается равной $2l+1$, и система уравнений (18) состоит из $2(2l+1)$ уравнений для $2(2l+1)$ неизвестных x_m, y_m . Однако, собственно говоря, нас интересуют не значения этих неизвестных, а в первую очередь значения энергии возмущения ε_2 , при которых эта система уравнений является разрешимой. Можно было бы воспользоваться общим условием разрешимости, согласно которому соответствующий детерминант порядка $2(2l+1)$ должен равняться нулю. Однако можно обойтись и без вычисления этого детерминанта.

Исходим из крайних значений числа m :

$$m_{\text{макс}} = +l \quad \text{и} \quad m_{\text{мин}} = -l.$$

Для этих значений на основании (16) получим:

$$W_{m+\frac{1}{2}} = 0 \quad \text{и} \quad \text{соответственно} \quad W_{m-\frac{1}{2}} = 0.$$

Вследствие этого в (18) второе и соответственно первое уравнения становятся одночленными. Условие разрешимости в этом случае сводится просто к следующему: множители при y_m и соответственно при x_m должны быть равны нулю, т. е.

$$\left. \begin{aligned} m = m_{\text{магн}} = +l, \quad \epsilon_2 = -A + lB - (l+1) \frac{\hbar c}{2E_0} eH, \\ m = m_{\text{кин}} = -l, \quad \epsilon_2 = -A + lB + (l+1) \frac{\hbar c}{2E_0} eH. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Часть энергии возмущения ϵ_2 , зависящая от магнитного поля, получится сразу, если мы опустим члены $-A + lB$, не зависящие от магнитного поля, т. е. эта часть будет равна [см. равенство (4)]:

$$\epsilon_{\text{магн}} = \mp (l+1) \frac{\hbar c}{2E_0} eH = \mp (l+1) \frac{e}{m_0} \frac{\hbar}{2c} H = \mp (l+1) \hbar \Delta_{\text{чн}}. \quad (19a)$$

Следовательно, для обоих этих крайних уровней магнитное расщепление при всех напряжённостях поля пропорционально H и кратно лоренцевскому нормальному расщеплению $\hbar \Delta_{\text{чн}}$. Энергетическое расстояние обоих уровней друг от друга равно

$$2(l+1) \hbar \Delta_{\text{чн}}. \quad (19b)$$

У s -термов ($l=0$) оно в два раза больше нормального (спиновая аномалия; см. т. I, гл. VI, § 5; множитель Ланде g для s -терма всегда равен 2).

Уравнения (18), как мы видели, в случае крайних значений $m = |l|$ теряют между собой связь (каждое из этих уравнений определяет соответствующее значение ϵ_2). Для всех промежуточных значений $m < |l|$ эти уравнения связи не теряют, так что верхнее из уравнений (18) содержит те же самые величины x_m, y_{m-1} , что и нижнее уравнение, но с индексами, уменьшенными на единицу. Следовательно, для простоты вычислений и исключения x, y , следовало бы индексы m нижнего уравнения (18) заменить через $m-1$. Однако гораздо более удобно вместо целых «волномеханических» квантовых чисел m ввести полуцелые, «спектроскопические» квантовые числа, которые, как и в т. I (см. например, гл. VIII, § 7), будут обозначаться через M . Следовательно, заменим:

$$\begin{aligned} &\text{в верхнем уравнении (18) } m \text{ через } M + \frac{1}{2}, \\ &\text{» нижнем » (18) } m \text{ » } M - \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

что соответствует переходу от m к $m-1$. Принимая во внимание значение $\Delta_{\text{чн}}$ из (4), получим:

$$\left. \begin{aligned} \left[\epsilon_2 + A + \left(M + \frac{1}{2}\right) B + \left(M - \frac{1}{2}\right) \hbar \Delta_{\text{чн}} \right] x_{M+\frac{1}{2}} - W_M B y_{M-\frac{1}{2}} = 0, \\ -W_M B x_{M+\frac{1}{2}} + \left[\epsilon_2 + A - \left(M - \frac{1}{2}\right) B + \left(M + \frac{1}{2}\right) \hbar \Delta_{\text{чн}} \right] y_{M-\frac{1}{2}} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Число M пробегает все полуцелые числа, соответствующие рассматриваемой промежуточной области значений m , т. е. значения от $-(l - \frac{1}{2})$ до $+(l - \frac{1}{2})$. Для каждого значения M получается своё условие разрешимости

мости в виде равенства нулю соответствующего детерминанта:

$$\begin{vmatrix} \epsilon_2 + A + \left(M + \frac{1}{2}\right)B + \left(M - \frac{1}{2}\right)h\Delta\nu_H & -W_M B \\ -W_M B & \epsilon_2 + A - \left(M - \frac{1}{2}\right)B + \left(M + \frac{1}{2}\right)h\Delta\nu_H \end{vmatrix} = 0. \quad (20a)$$

Решение этого уравнения с учётом значения W_M из (16) имеет вид:

$$\epsilon_2 = -A - \frac{1}{2}B + Mh\Delta\nu_H \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 B^2 + MBh\Delta\nu_H + \frac{1}{4}h^2\Delta\nu_H^2}. \quad (206)$$

Из соображений удобства мы знак у M изменили на обратный, так что магнитные уровни вместо M нумеруются числом $-M$, что ввиду их симметричного положения допустимо.

Легко заметить, что хотя вычисление проводилось для случаев $|M| \leq l - \frac{1}{2}$, решение (206) охватывает также и решение (19) для крайних случаев, если при *верхнем* знаке перед корнем для M допустить также и значение $|M| = l + \frac{1}{2}$. Поэтому решения (19) и (206) могут быть объединены в следующих формулах:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_2 &= -A - \frac{1}{2}B + Mh\Delta\nu_H + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 B^2 + MBh\Delta\nu_H + \frac{1}{4}h^2\Delta\nu_H^2} \\ &\quad \text{для } |M| \leq l + \frac{1}{2}, \\ \epsilon_2 &= -A - \frac{1}{2}B + Mh\Delta\nu_H - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 B^2 + MBh\Delta\nu_H + \frac{1}{4}h^2\Delta\nu_H^2} \\ &\quad \text{для } |M| \leq l - \frac{1}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Эти формулы выражают дублетную структуру щелочных термов. Первой строчкой в (21) описывается $2l + 1$ магнитных уровней, которые соответствуют статистическому весу $2l + 2$ и внутреннему квантовому числу $j = l + \frac{1}{2}$, второй строчкой описываются $2l$ магнитных уровней, соответствующих весу $2l$ и $j = l - \frac{1}{2}$. Сумма весов $2(2l + 1)$ равна удвоенному значению кратности вырождения $p = 2l + 1$.

Положение обеих линий дублета при $H \rightarrow 0$ или, что то же самое, при $\Delta\nu_H \rightarrow 0$ определяется согласно (21) формулами:

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= -A - \frac{1}{2}B + \left(l + \frac{1}{2}\right)B = -A + lB & (j = l + \frac{1}{2}), \\ \epsilon_2 &= -A - \frac{1}{2}B - \left(l + \frac{1}{2}\right)B = -A - (l + 1)B & (j = l - \frac{1}{2}). \end{aligned}$$

Отсюда получается расстояние между линиями дублета, выраженное в энергетических $\Delta\epsilon$ или в частотных $\Delta\nu_0$ единицах:

$$\Delta\epsilon = h\Delta\nu_0 = (2l + 1)B, \quad (21a)$$

а также среднее значение энергии:

$$\varepsilon_m = -A - \frac{1}{2}B. \quad (21б)$$

Будем отсчитывать положение линий дублета от этого среднего значения энергии и соответствующую разность частот будем обозначать через $\Delta\nu$. Тогда можно написать:

$$h \Delta\nu = \varepsilon_2 - \varepsilon_m. \quad (21в)$$

Далее введём величину

$$v = \frac{\Delta\nu_0}{\Delta\nu_H},$$

обратно пропорциональную напряжённости магнитного поля.

Тогда из (21) непосредственно следует:

$$\left. \begin{aligned} \Delta\nu &= \Delta\nu_H \left\{ M + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{2Mv}{l + \frac{1}{2}} + v^2} \right\}, & |M| \leq j = l + \frac{1}{2}, \\ \Delta\nu &= \Delta\nu_H \left\{ M - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{2Mv}{l + \frac{1}{2}} + v^2} \right\}, & |M| \leq j = l - \frac{1}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Эти формулы точно совпадают с формулами теории Фогта [т. I, (VIII.7.1)], из которых там были получены не только дублеты аномального эффекта Зеемана при слабых полях (рис. 132), но также и переходы при средних полях и эффект Пашена при сильных полях (рис. 133). Эти формулы уже более не являются линейными относительно H (кроме случая $|M| = l + \frac{1}{2}$; см. выше) и не удовлетворяют (за исключением слабых полей) правилу Престона (т. I, гл. VIII, § 6).

Так же как и в т. I, здесь надо указать, что соответствующие формулы у Фогта имели иное значение, чем в рассматриваемом случае, так как он рассматривал поглощение, а не излучение и имел дело с расщепленным линиям, а не с расщеплением термов. То обстоятельство, что Фогту ещё в 1913 г. без знания квантовой теории и без представления о спине удалось получить путём формального обобщения магнито-оптических представлений Лоренца формулы, описывающие результаты опыта с линиями типа D -линий, эквивалентные результатам теории Дирака, представляется нам сейчас удивительным.

Необходимо сказать несколько слов о предельном случае слабых полей $H \rightarrow 0$, точнее говоря, $\Delta\nu_H \ll \Delta\nu_0$, ввиду связи этого случая с общей формулой для множителя g Ланде. Из (22) [или непосредственно из (21) для $h \Delta\nu_H \ll (2l + 1)B$] при $v \rightarrow \infty$ получаем следующую формулу, приведённую в т. I (VIII.7.3):

$$\Delta\nu \mp \frac{1}{2} \Delta\nu_0 = M \left(1 \pm \frac{1}{2l + 1} \right) \Delta\nu_H. \quad (23)$$

Левая часть этого равенства даёт расстояние компоненты M -го магнитного терма от одного или другого первоначального дублетного уровня (раньше мы брали расстояние от середины этих дублетных уровней). Справа мы узнаем в $2l + 1$ знаменатель Рунге для D -линий (равный 3 для p -термов); см. т. I, гл. VIII, § 6. Множитель g Ланде есть расстояние между следующими друг за другом магнитными компонентами при эффекте Зеемана, выра-

женное в долях $\Delta\nu_H$. Следовательно, этот множитель на основании (23) равен

$$g = 1 \pm \frac{1}{2l+1}. \quad (23a)$$

Это выражение точно согласуется с данными таблицы 45 т. I (гл. VIII, § 6) для дублетных систем и, например, даёт (для s -термов принимается во внимание только верхний знак):

$$\begin{array}{cccccc} \text{для } p_{3/2} & p_{1/2} & d_{5/2} & d_{3/2} & \dots & s_{1/2}, \\ g = & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} & \frac{6}{5} & \frac{4}{5} & \dots & 2. \end{array}$$

Основываясь на представлении о спине, можно получить общую формулу для g в случае произвольных мультиплетных систем, хотя, как мы знаем, обобщение уравнения Дирака на системы многих электронов ещё неизвестно. Для этого достаточно исходить из приближённого, дополненного соответствующими членами уравнения Паули. Вообще же говоря, наиболее изящный метод получения формулы для g и рассмотрения случая мультиплетных систем основывается на теории групп¹⁾.

Развитая выше теория дублетных систем содержит в себе больше, чем только определение магнитного расщепления. Она позволяет, например, на основании выражения (15) для B и формулы (21a) рассмотреть величину расщепления $\Delta\nu_0$ в отсутствие поля для ряда щелочных металлов. Таким путём можно показать, что $\Delta\nu_0$ убывает с ростом главного квантового числа n (при закреплённом l) и растёт с увеличением порядкового номера Z (при закреплённых n и l)²⁾.

После нахождения возмущённой энергии ϵ_2 из уравнения (18) находим x_m и y_m и, таким образом, получаем из (10a) и (5) исходные функции нулевого приближения ψ_0 , на которые действует магнитное возмущение. Знание этой функции позволит ответить на все вопросы относительно интенсивности, поляризации и правил отбора при эффекте Зеемана.

Поляризация имеет тот же характер, что и при нормальном эффекте Зеемана: $\Delta M = 0$ даёт π -компоненты, $\Delta M = \pm 1$ даёт σ -компоненты. В правилах отбора особенно интересно то, что переходы в общем случае не ограничивают изменения j , только для очень слабых и очень сильных полей $\Delta j = 0$ или $\Delta j = \pm 1$; для средних полей возможно иметь и при $|\Delta j| > 1$ неисчезающую интенсивность переходов. Это объясняет казавшиеся удивительными эффекты, наблюдавшиеся Пашеном и Баком в триплетных дуговых и дублетных искровых спектрах щелочно-земельных элементов, о которых шла речь в т. I (гл. VIII, конец § 7).

¹⁾ E. Wigner, Gruppentheorie, Braunschweig, 1931.

²⁾ Более подробному рассмотрению посвящена диссертация Шлатерера [R. Schlat-
terer, Ann. d. Phys. 27, 643 (1936)]. В этой работе даны вычисления, опущенные
нами при выводе (16). При вычислениях оказывается особенно удобной дарвинновская
нормировка волновых функций, о которой мы говорили на стр. 25.

ГЛАВА VI ФОТОЭФФЕКТ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР

В этой главе мы рассмотрим фотоэлектрический эффект на отдельном атоме, а не более хорошо изученный экспериментально и более важный эффект на металле, нашедший широкие технические применения в фотоэлементах. С помощью обычного света можно лишь в общих чертах изучить тонкие характеристики фотоэлектрического эффекта на отдельном атоме, особенно распределение электронов по различным направлениям; поэтому необходимо использовать жёсткое излучение (рентгеновские или γ -лучи), чтобы получать электроны со скоростями, лежащими в области, пригодной для измерений.

Особый исторический интерес в области теории фотоэффекта имеет работа Эйнштейна 1905 г. (см. т. I, гл. I, § 6). В этой работе был написан закон сохранения энергии для фотона с энергией $h\nu$ и вырванного фотопотока с кинетической энергией $E_{кин}$:

$$E_{кин} = h\nu - |W|, \quad (1)$$

где $|W|$ — работа выхода, в статье Эйнштейна — из металла, а в данном случае — из соответствующей оболочки атома. С точки зрения классической волновой теории это соотношение оставалось загадкой; необходимо было бы допустить, особенно в случае жёстких рентгеновских лучей, невероятно большие промежутки времени для того, чтобы классическим путём накопить в атоме энергию порядка $h\nu$, а затем всю эту энергию передать вырванному фотопотоку. Иначе обстоит дело в волновой механике. Здесь характер зависимости от времени собственных функций, возмущённых падающей световой волной, с учётом соотношения де Бройля между волновыми числами стационарных состояний и их энергиями сразу даёт уравнение Эйнштейна (1).

Впервые это было установлено Вентцелем¹⁾, который для не слишком жёстких лучей сумел вывести также и закон углового распределения:

$$J \sim \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \quad (2)$$

(см. пунктирную кривую на рис. 26).

Соотношение (2) предполагает, что излучение поляризовано (x — направление падения излучения, y — направление колебаний электрического вектора этого излучения). В случае неполяризованного света мы получим $J \sim \sin^2 \theta$, распределение аксиально симметрично относительно оси x . Соот-

¹⁾ G. Wentzel, Zs. f. Phys. 40, 574 (1926); 41, 828 (1927); G. Beck, там же 41, 443 (1927).

ношение (2), особенно в отношении зависимости от угла φ , подтверждено на опытах с рентгеновскими лучами в широком диапазоне длин волн ($0,3-0,8 \text{ \AA}$)¹⁾ (приёмники электронов располагаются вокруг оси луча).

Вентцель также указал, что соотношение (2) верно лишь как первое приближение и нуждается в дальнейшем уточнении в отношении зависимости от угла ϑ . Соответствующую поправку он получил наглядно, учтя световое давление, действующее со стороны падающего излучения на вылетевший электрон. При более точном проведении вычислений во втором приближении²⁾ для фотоэлектронов, вырываемых из K -оболочки, получается следующее соотношение:

$$J \sim \sin^2 \vartheta (1 + 4 \beta \cos \vartheta) \cos^2 \varphi, \quad (3)$$

где $\beta = \frac{v}{c}$ и v — скорость электрона, освобождённого с K -оболочки. Таким образом, направление вылета фотоэлектронов несколько смещается в направлении падающего излучения, что выражено сплошной кривой на рис. 26.

Скорость фотоэлектрона v , о которой здесь идёт речь, на основании волномеханических расчётов одинакова для всех направлений в полном соответствии с уравнением Эйнштейна.

Второй член в скобке (3) оказывается в два раза большим, чем можно было ожидать на основании представления о световом давлении [по вычислениям Вентцеля в соотношении (3) вместо величины 4β должна стоять величина 2β]. Таким образом, при строгом волномеханическом расчёте мы получаем парадоксальный результат, что лишь часть эффекта может быть объяснена за счёт передачи импульса излучением, так что атом как целое должен испытать отдачу в среднем в направлении, обратном направлению падающего луча. Разъяснением этого парадокса мы займёмся в § 3.

Необходимо сделать одно принципиальное замечание: фотоэффект возможен лишь на связанных электронах, а не на свободных (в противоположность эффекту Комптона). Условие сохранения импульса требует, чтобы в явлении принял участие весь атом. Это обстоятельство вызывает определённые трудности при рассмотрении фотоэффекта на металлах. «Свободные» электроны металла не могут быть непосредственно вырваны светом, необходимо принять во внимание связь этих электронов с решёткой металла.

Тот факт, что указанный эффект для K -оболочки действительно в два раза больше того, которое ожидается на основании расчётов по классической теории, подтверждается многочисленными экспериментальными работами

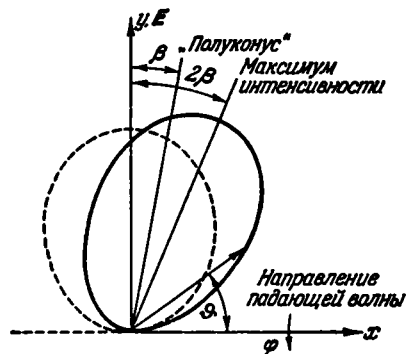


Рис. 26. Интенсивность фотоэмиссии, пропорциональная вероятному числу испущенных электронов, вычерчена в виде полярной диаграммы в плоскости $\varphi = 0$: пунктирная кривая — для случая мягких лучей, сплошная — для жёстких. К последнему случаю относятся указанные на рисунке «максимум интенсивности» и «полуконус», смысл которых разъяснён в тексте § 3.

¹⁾ F. W. Bubb, Phys. Rev. 23, 137 (1924); F. Kirchner, Ann. d. Phys. 88, 521 (1927).

²⁾ A. Sommerfeld u. G. Schur, Ann. d. Phys. 4, 409 (1930).

(Боте, Оже, Вильямс — Нутталль — Барлоу, Андерсон, Ватсон). Укажем особенно на исследование Лутце¹⁾, проведённое под руководством Кирхнера, экспериментировавшего с особенно жёсткими лучами ($\lambda = 0,135 \text{ \AA}$, $\beta = 0,585$). Там же даны более подробные литературные указания. Получено почти полное согласие с теоретическими соотношениями (3) и (4).

Можно продолжить вычисление высших приближений. Однако при этом мы наталкиваемся на ограничение справедливости нерелятивистского расчёта (о первой релятивистской поправке будет сказано в § 8). Точная в шредингеровском смысле формула, т. е. формула, которая была бы справедлива в любом приближении, если бы мы пренебрегли релятивистскими поправками, была почти одновременно дана Фишером²⁾ (по предложению Вентцеля занявшимся этим вопросом) и Заутером³⁾. Заутер использовал ряды в полярных координатах, Фишер вёл расчёт в параболических координатах. Соответствующая формула будет выведена в § 4 более простым путём, непосредственным интегрированием соответствующего матричного элемента. Эта формула имеет вид:

$$J \sim \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1 - \beta \cos \theta)^4}, \quad (4)$$

если мы отбросим обозначенную в § 4 через γ поправочную величину, которая при нерелятивистском расчёте не может быть гарантирована и которая, как доказано в § 8, действительно исчезает в первом релятивистском приближении. Если выражение (4) разложить в ряд по степеням β , то в качестве второго приближения снова получим соотношение (3), в то время как более высокие приближения с β^2 , β^3 , ... не являются достоверными. Поэтому, собственно говоря, соотношение (4) не содержит в себе больше, чем (3); это выражение более предпочтительно лишь вследствие своей большей обзорности.

Аналогичный вид выражения, в частности, возникает, когда мы в § 6 перейдём к фотоэффекту в L -оболочке. Формулы будут более сложными; особенно интересно то, что наряду с «анизотропными» составными частями, т. е. такими, которым соответствуют обсуждённые выше вытянутые формы, появятся также «изотропные» составные части, для которых полярная диаграмма фотоэмиссии, если отвлечься от отклонения электронов вперёд, имеет форму окружности.

Часто пытались упростить расчёты фотоэффекта тем, что вместо точных собственных функций вырываемых электронов брали приближённые функции в виде плоской волны. Этот приём в случае K -оболочки даёт правильное распределение, но для L -оболочки приводит к неправильному результату, поскольку оказываются утерянными изотропные составные части. Между тем точными измерениями Оже фотоэффекта на L -оболочке с достоверностью доказано, что эта изотропная часть существует.

Мы будем вести расчёт для стационарного случая, т. е. будем рассматривать установившийся процесс фотоэмиссии при неизменном продолжительном облучении. Однако весьма поучительно на основании теории возмущений Дирака рассмотреть процесс возникновения фотоэффекта. Это будет сделано в § 7.

¹⁾ E. Lutz, Münchener Dissertation; Ann. d. Phys. 9, 858 (1931). См. также работу F. F. Eggleston и L. A. Martin, Proc. Roy. Soc. 162, 95 (1937), где констатировано великолепное совпадение между опытом (K -оболочка аргона) и теорией.

²⁾ J. Fischer, Ann. d. Phys. 8, 821 (1931); 11, 489 (1931).

³⁾ F. Sauter, Ann. d. Phys. 9, 217 (1931); 11, 454 (1931).

Формулы (2) — (4) выписаны с точностью до множителя пропорциональности (что отмечено значком \sim). Если мы эти множители добавим и проинтегрируем по всем направлениям, то получим полный выход электронов, на основании которого затем можно вычислить так называемый «истинный коэффициент абсорбции» падающего излучения. Этот вопрос для K -оболочки будет обсужден в § 5.

§ 2. ФОТОЭФФЕКТ В K -ОБОЛОЧКЕ, СТАЦИОНАРНЫЙ СЛУЧАЙ. РАСЧЁТ В ПОЛЯРНЫХ КООРДИНАТАХ

При изложении этого вопроса будем исходить из формул, выписанных в теории дисперсии в гл. V, § 3. Так же как и там, падающая волна будет описываться уравнениями (1.1a) (рис. 22). Состояние атома, возмущённого этой волной, даётся выражением (11) той же главы. Различие заключается лишь в том, что если там мы учитывали лишь вклад дискретного спектра собственных значений, то теперь нам необходимо учесть непрерывный спектр собственных значений. Сумму по дискретному спектру собственных значений будем обозначать многоточием, энергию непрерывного спектра — через W и собственные функции — через $\psi(W)$. Первоначальное состояние электрона, т. е. его пребывание в K -оболочке, характеризуется некоторым значением W_0 и собственной функцией ψ_0 . При этих условиях упомянутое выше равенство (11) приобретает следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} u &= \psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} W_k t} + \dots + \frac{ie}{m} \frac{\hbar E}{4\pi\nu} \left[X e^{-\frac{i}{\hbar} (W_0 + \hbar\nu) t} + Y e^{-\frac{i}{\hbar} (W_0 - \hbar\nu) t} \right], \\ X &= \sum \int \frac{A(W) \psi(W) dW}{W_0 - W + \hbar\nu}, \quad Y = \sum \int \frac{A(W) \psi(W) dW}{W_0 - W - \hbar\nu}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Множитель, стоящий перед фигурными скобками в первой строчке, получается из соответствующего множителя в (V.3.11), если там принять во внимание предыдущие соотношения (4) и (1a). Величина E обозначает амплитуду напряжённости E_y в падающей световой волне.

Происхождение операции $\sum \int$ следующее: когда мы производим расчёт в полярных координатах, то собственные функции зависят не только от непрерывного спектра собственных значений энергии W , но и от квантовых чисел угловых координат, принимающих дискретные значения l, m [вырождение по l и m ; более подробно вместо $\psi(W)$ следовало бы написать $\psi_{lm}(W)$]. Для того чтобы учесть все состояния, нам, кроме интегрирования по W от 0 до ∞ , необходимо также произвести суммирование по l, m .

Сравнивая соотношение (1) с упомянутым выше соотношением (11), мы видим, что величина A_{jk} теперь заменяется на величину $A(W) dW$ и индекс k у невозмущённого состояния должен быть опущен. Величина $A(W)$ по аналогии с равенством (9) и (9a) на стр. 310 имеет следующее значение:

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial y} e^{\pm 2\pi i \frac{\omega}{\lambda}} = \dots + \sum \int A(W) \psi(W) dW, \quad (2)$$

$$A(W) = \int \psi^*(W) \frac{\partial \psi_0}{\partial y} e^{\pm 2\pi i \frac{\omega}{\lambda}} d\tau. \quad (2a)$$

Как это следует из только что упомянутых равенств страницы 310, знак плюс при $2\pi l$ принадлежит к X , знак минус — к Y .

Прежде всего займёмся зависящим от времени множителем при X в соотношении (1). Величина, заключённая в скобках в показателе степени, даёт нам кинетическую энергию испущенного электрона. Эта кинетическая энергия, следовательно, равна

$$E_{\text{кин}} = W_0 + h\nu = h\nu - |W_0|. \quad (3)$$

Величина W_0 , энергия электрона в исходном состоянии, когда электрон связан, будет отрицательной. Поэтому мы написали $W_0 = -|W_0|$. Величина $|W_0|$ означает работу выхода или энергию ионизации начального состояния (в частности K -оболочки). Следовательно, равенство (3) совпадает с уравнением Эйнштейна (1.1). Таким образом, это равенство, если и не объяснено, то во всяком случае весьма тесно увязано с основными положениями волновой механики. Своё объяснение оно находит в представлении о дискретных количествах энергии величины $h\nu$, связанных со светом.

Что же касается множителя при Y в соотношение (1), то нам нет необходимости его более подробно обсуждать, так как будет показано, что величина Y в фотоэффект не даёт никакого вклада.

Рассмотрим, далее, функцию $\psi(W)$ в выражении для X . Она, кроме зависимости от W , содержит в себе также зависимость от координат точки наблюдения. Однако нас существенно интересуют лишь точки на большом удалении от атома, поэтому мы можем для ψ взять её асимптотическое представление. Как известно, ψ разлагается на два слагаемых, из которых одно слагаемое соответствует падающей волне, другое — рассеянной сферической волне; оба эти слагаемые обозначены через Q_1 и Q_2 в (II.7.33,34). Как будет показано далее и как это очевидно из физических соображений, при соответствующей интерпретации в формулах для явлений фотоэмиссии должны быть существенны лишь члены, связанные с рассеянной волной. Пока же мы должны вести расчёт с полным асимптотическим выражением собственной функции ψ . Поэтому полагаем

$$\psi = \frac{1}{2} (\psi_{\text{вс}}^{(1)} + \psi_{\text{вс}}^{(2)}). \quad (4)$$

Ввиду этого интеграл, выражающий X , распадается на две части, которые могут быть записаны единой формулой следующим образом:

$$X^{(1,2)} = \sum_0^{\infty} \int \frac{A(W) dW}{W_0 - W + h\nu} \psi_{\text{вс}}^{(1,2)}, \quad X = \frac{1}{2} (X^{(1)} + X^{(2)}). \quad (4a)$$

Более удобно в качестве переменной интегрирования взять вместо W волновое число k . Поэтому полагаем

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad (5)$$

и равенство (3) переписываем в следующем виде:

$$W_0 + h\nu = h\nu - |W_0| = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2, \quad (5a)$$

где k_0 есть волновое число, соответствующее той скорости, с которой фотоэлектрон по закону Эйнштейна покидает атом. Из (5) и (5a) следует:

$$\frac{dW}{W_0 - W + h\nu} = \frac{2k dk}{k_0^2 - k^2} \quad (5b)$$

и (4а) переходит в следующее выражение:

$$X^{(1,2)} = \sum_0^\infty \int_0^\infty A(k) \psi_{\text{ao}}^{(1,2)}(k) \frac{2k dk}{k_0^2 - k^2}. \quad (6)$$

Обозначением $A(k)$ и $\psi(k)$ подчеркнуто, что далее эти величины будут рассматриваться как функции от k , а не функции от W .

Относительно пути интегрирования в (6) необходимо заметить следующее: в соответствии с тем, что W является положительной вещественной величиной, путь интегрирования должен идти вдоль действительной оси от 0 до ∞ . Но это невозможно, так как знаменатель $k_0^2 - k^2$ в точке $k = k_0$ обращается в нуль. Для того чтобы избежать этой сингулярности, мы должны обойти эту точку либо снизу, как это изображено на рис. 27 сплошной линией, либо сверху, как это указано пунктирной линией. Мы этот обход совершим снизу. Это позволит исключить из рассмотрения сходящуюся к атому волну, далее обозначаемую через $\psi_{\text{ao}}^{(3)}$. Действительно, беря зависимость от времени, как обычно, в форме $e^{-i\omega t}$, мы на основании (II.7.33) получим следующий вид зависимости $\psi_{\text{ao}}^{(1,2)}$ от r :

$$\psi_{\text{ao}}^{(1)} \sim \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad \psi_{\text{ao}}^{(3)} \sim \frac{e^{+ikr}}{r}.$$

Следовательно, путь интегрирования в $X^{(1)}$ можно повернуть до совпадения с отрицательной мнимой полуосью, не пересекая особой точки. При этом подинтегральное выражение исчезает в нижней полуплоскости на бесконечности. Вдоль отрицательной мнимой оси мы будем иметь:

$$\psi_{\text{ao}}^{(1)} \sim \frac{e^{-|k|r}}{r} \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty,$$

так что $X^{(1)}$ для $r \rightarrow \infty$ исчезает.

По-другому обстоит дело в случае $X^{(2)}$. Путь интегрирования в этом случае надо перевести в верхнюю полуплоскость, где на бесконечности подинтегральное выражение исчезает; вдоль положительной мнимой оси будем иметь:

$$\psi_{\text{ao}}^{(2)} \sim \frac{e^{-|k|r}}{r} \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Но теперь путь интегрирования охватывает особую точку $k = k_0$. Поэтому получаем следующее значение:

$$X^{(2)} = -2\pi i \sum A(k_0) \psi_{\text{ao}}^{(2)}(k_0). \quad (6a)$$

Если бы мы выбрали путь, обозначенный пунктирной линией, то на основании аналогичных соображений получили бы:

$$X^{(2)} = 0, \quad X^{(1)} = 2\pi i \sum A(k_0) \psi_{\text{ao}}^{(1)}(k_0), \quad (6б)$$

т. е. вместо излучения получили бы не имеющую физического смысла сходящуюся волну. Неоднозначность здесь получается потому, что вообще задача решения волнового уравнения становится однозначной лишь при

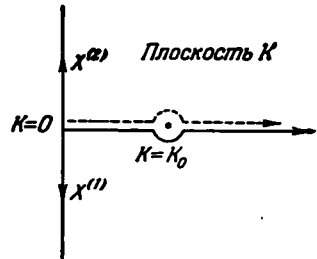


Рис. 27. Пути интегрирования для $X^{(1)}$ и $X^{(2)}$ плоскости k . В качестве пути интегрирования выбирается путь, вычерченный сплошной линией; пунктирный путь привёл бы к «сходящимся» волнам.

добавлении граничных условий на бесконечности, так называемых «условий излучения» (ср. примечание 1 на стр. 330). В нашем случае мы этому условию удовлетворили выбором пути интегрирования.

Теперь легко обосновать выказанное выше утверждение, что часть, связанная с Y в равенстве (1), не даёт никакого вклада в фотоэмиссию. Действительно, произведём в выражении для Y ту же замену переменных (5). Тогда получаются два выражения $Y^{(1,2)}$, которые представляются интегралами вида (6) с той разницей, что теперь в знаменателе стоит величина $k_0'^2 - k^2$, где

$$k_0'^2 = -h\nu + W_0 = -h\nu - |W_0| < 0. \quad (6b)$$

Следовательно, k_0' является мнимой величиной. Поэтому путь интегрирования в $Y^{(1)}$ и $Y^{(2)}$ мы можем перевести в путь вдоль отрицательной и соответственно положительной мнимых полуосей, так как вдоль вещественной оси особых точек нет. То обстоятельство, что полюсы $\pm i|k_0'|$ не дают никакого вклада при интегрировании вдоль мнимой полуоси, следует из того, что в этих точках $\psi_{\text{ас}}^{(1,2)}$ при $r \rightarrow \infty$ исчезают как $\exp(-|k_0'|r)$.

• Выпишем теперь общий член ряда (6а), характеризуемый квантовыми числами l, m . На основании формул (II.7.1), (II.7.11) и (II.7.28), если мы заменим в этих формулах k через k_0 , получим собственные функции, принадлежащие этим квантовым числам:

$$\psi_{lm} = N_{lm} R_l(k_0, r) P_l^m(\cos \vartheta) \frac{\cos}{\sin} m\varphi, \quad (7)$$

$$R_l(k_0, r) = (2lk_0r)^{-l-1} \frac{1}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2}\right)^{n-l-1} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{-n-l-1} e^{-2ik_0r x} dx. \quad (7a)$$

Для удобства вычислений в дальнейшем мы в (7) величину $e^{im\varphi}$ заменим через $\frac{\cos}{\sin} m\varphi$, так что m можно считать положительным. Величина n означает Z/lk_0a .

На основании (30) стр. 106 входящее в (6а) асимптотическое значение $\psi_{\text{ас}}^{(2)}(k_0)$ этой собственной функции равно

$$\psi_{\text{ас}}^{(2)}(k_0) = Q_2 N_{lm} P_l^m(\cos \vartheta) \frac{\cos}{\sin} m\varphi, \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} Q_2 = e^{ik_0r} (-2lk_0r)^{-n-1} \frac{e^{-i\pi(n+\frac{1}{2})}}{\Gamma(-n+l+1)}. \quad (8a)$$

С другой стороны, значение множителя $A(k_0)$, входящего в (6а), даётся выражением (2а) (с выбором положительного значения показателя степени у e , как указано выше), при этом для $\psi^*(W)$ надо взять сопряжённое к (7) выражение [но не сопряжённое к асимптотическому представлению (8)!]. Выписывая явно индексы l, m и переходя к полярным координатам:

$$d\tau = r^2 dr d\omega, \quad d\omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi,$$

получим:

$$A_{lm}(k_0) = N_{lm} \int_0^\infty r^2 dr R_l^*(k_0, r) \int d\omega P_l^m(\cos \vartheta) \frac{\cos}{\sin} m\varphi \frac{\partial \psi_0}{\partial y} e^{2\pi i \frac{a}{\lambda}}. \quad (9)$$

Значение ψ_0 возьмём из таблицы на стр. 80:

$$\psi_0 = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{1/2} e^{-\frac{Z}{a} r}. \quad (10)$$

Если полярные координаты расположить так, как это сделано на рис. 26 (стр. 373), т. е. положив

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \cos \varphi, \quad z = r \sin \theta \sin \varphi,$$

то получается:

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{1/2} \frac{y}{r} e^{-Z \frac{r}{a}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \varphi e^{-Z \frac{r}{a}} \quad (10a)$$

и

$$e^{2\pi i \frac{\omega}{\lambda}} = e^{2\pi i \frac{r}{\lambda} \cos \theta}. \quad (10b)$$

Поэтому угловая часть (9) запишется следующим образом:

$$\int d\omega \dots = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{1/2} e^{-Z \frac{r}{a}} \Phi \Theta, \quad (11)$$

$$\Phi = \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\cos}{\sin} m\varphi \cos \varphi, \quad (11a)$$

$$\Theta = \int_0^{\pi} \sin^2 \theta d\theta P_l^m(\cos \theta) e^{2\pi i \frac{r}{\lambda} \cos \theta}. \quad (11b)$$

Интеграл Φ вычисляется немедленно. Именно, мы имеем:

$$\int d\varphi \sin m\varphi \cos \varphi = 0 \quad \text{для всех } m; \quad (12)$$

$$\int d\varphi \cos m\varphi \sin \varphi = \begin{cases} 0 & \text{для всех } m \neq 1, \\ \pi & \text{для } m = 1. \end{cases} \quad (12a)$$

Отсюда сразу следует, что все $A_{l,m}$ равенства (9), в которые входит $\sin m\varphi$, обращаются в нуль, а из тех $A_{l,m}$, в которые входит $\cos m\varphi$, отличными от нуля могут быть только A_{11} .

Для того чтобы вычислить интеграл Θ , в котором на основании сказанного надо положить $m = 1$, воспользуемся разложением

$$e^{2\pi i \frac{r}{\lambda} \cos \theta} = 1 + 2\pi i \frac{r}{\lambda} \cos \theta + \dots \quad (13)$$

и рассмотрим два случая:

- а) мягкое излучение, первое приближение;
- б) жёсткое излучение, второе приближение.

В случае а) мы в (13) ограничиваемся первым членом, принимая, что λ является большой величиной по сравнению с тем расстоянием r_0 от ядра, на котором ещё может иметь место фотоэлектрическое действие. Заметим при этом, что r_0 может быть во всяком случае не больше чем a , так как конструкция функции ψ_0 такова, что при интегрировании по r область интегрирования $r > a$ является несущественной. В этом случае имеем:

$$\Theta = \int_0^{\pi} \sin^2 \theta d\theta P_1^1(\cos \theta). \quad (13a)$$

В случае б) достаточно будет, кроме первого члена, учесть также и второй член; высшие члены, значение которых проблематично ввиду того,

что мы пренебрегаем релятивистскими эффектами, будут приняты во внимание в § 4. В этом случае имеем:

$$\Theta = \int_0^\pi \sin^2 \vartheta \, d\vartheta P_l^1(\cos \vartheta) \left(1 + 2\pi i \frac{r}{\lambda} \cos \vartheta\right). \quad (136)$$

Вычисление (13а) и (136) становится очевидным, если мы примем во внимание, что при обычной нормировке имеют место равенства:

$$P_1^1 = \sin \vartheta, \quad P_2^1 = 3 \sin \vartheta \cos \vartheta. \quad (14)$$

Положив $x = \cos \vartheta$, запишем:

а) *мягкое излучение:*

$$\Theta = \int_{-1}^{+1} P_l^1(x) P_l^1(x) dx; \quad (15а)$$

б) *жесткое излучение:*

$$\Theta = \int_{-1}^{+1} P_l^1(x) P_l^1(x) dx + \frac{2\pi i}{3} \frac{r}{\lambda} \int_{-1}^{+1} P_l^2(x) P_l^1(x) dx. \quad (15б)$$

Принимая во внимание ортогональность шаровых функций, из (15а) заключаем, что

$$\Theta = 0, \quad \text{кроме случая } l = 1.$$

Следовательно, из всех коэффициентов A_{ll} неисчезающим является лишь A_{11} , и весь ряд (6а) сводится к одному члену:

$$X^{(2)} = -2\pi i A_{11} \psi_{\text{вс}}^{(2)}(k_0).$$

Учитывая равенство (8), в котором надо положить $l = m = 1$ и сохранить лишь члены с косинусами, мы получим следующую угловую зависимость $X^{(2)}$:

$$X^{(2)} \sim P_1^1(\cos \vartheta) \cos \varphi,$$

т. е. ввиду (14)

$$X^{(2)} \sim \sin \vartheta \cos \varphi.$$

Но ту же самую зависимость от углов имеет и величина X и волновая функция u равенства (1), так как первый член этого равенства и члены, отвечающие дискретному спектру (которые обозначены в этом равенстве многоточием), при $r \rightarrow \infty$ исчезают; об исчезновении члена с Y уже сказано выше. Следовательно, мы имеем:

$$u \sim \sin \vartheta \cos \varphi \quad \text{и} \quad |u|^2 \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi.$$

Величина $|u|^2$ означает плотность освобождаемых электронов и поэтому пропорциональна интенсивности эмиссии электронов, обозначенной в § 1 через J . Поэтому для мягкого излучения найдём:

$$J \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi, \quad (16)$$

как это и утверждалось в (1.2).

Вычисление угловой части для жесткого излучения менее просто. Равенство (15б) показывает, что $\Theta \neq 0$ для двух значений l , именно для $l = 1$

и $l=2$. На основании обычных формул нормировки (I.9.30) из (15б) находим:

$$\left. \begin{aligned} \text{для } l=1 \quad \Theta &= \int_{-1}^{+1} [P_1^1(x)]^2 dx = \frac{4}{3}, \\ \text{для } l=2 \quad \Theta &= \frac{2\pi l}{3} \frac{r}{\lambda} \int_{-1}^{+1} [P_2^1(x)]^2 dx = \frac{8\pi l}{5} \frac{r}{\lambda}. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Отсюда следует, что в ряду с A_{11} , отличными от нуля, будут два члена, именно с A_{11} и A_{21} . Из (9), (11), (12а) и (17) получается:

$$\left. \begin{aligned} A_{11} &= N_{11} \frac{4}{3} \sqrt{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} r^2 dr R_1^*(k_0, r) e^{-Z \frac{r}{a}}, \\ A_{21} &= N_{21} \frac{8\pi l}{5\lambda} \sqrt{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} r^3 dr R_2^*(k_0, r) e^{-Z \frac{r}{a}}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Здесь для R мы используем представление (7а) (с изменением знака у i и n ввиду перехода к сопряжённому выражению) и выполним интегрирование по r . Это интегрирование для обоих A одинаково [множители r^2 и r^3 сокращаются с соответствующей частью множителя $(2ik_0 r)^{-l-1}$ в (7а)]. Находим:

$$\int_0^{\infty} dr e^{-\left(\frac{Z}{a} - 2ik_0 r\right)r} = \frac{1}{2ik_0 x - \frac{Z}{a}} = \frac{1}{2ik_0 \left(x - \frac{n}{2}\right)},$$

причём последний переход сделан ввиду того, что $n = Z/ik_0 a$. Благодаря этому выражения (18) принимают вид:

$$\left. \begin{aligned} A_{11} &= N_{11} \frac{4}{3} \sqrt{\pi} (2ik_0)^{-3} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{1}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2}\right)^{-n-2} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{n-2} \frac{dx}{x - \frac{n}{2}}, \\ A_{21} &= -N_{21} \frac{8\pi l}{5\lambda} \sqrt{\pi} (2ik_0)^{-4} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{1}{2\pi} \oint \left(x + \frac{1}{2}\right)^{-n-3} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{n-3} \frac{dx}{x - \frac{n}{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (18a)$$

Теперь можно вычислить оставшиеся комплексные интегралы по x . Эти интегралы [ср. стр. 103, уравнение (16)] берутся по контуру, окружающему точки ветвления $x = \pm \frac{1}{2}$, и сводятся к вычету в точке $x = \frac{n}{2}$. Для первого и второго интегралов находим: $-i2^4(n+1)^{-n-2}(n-1)^{n-2}$ и соответственно $-i2^6(n+1)^{-n-3}(n-1)^{n-3}$. Отношение значения второго интеграла к первому равно

$$\frac{4}{n^2 - 1}.$$

Отсюда на основании (18а) заключаем, что

$$\frac{A_{21}}{A_{11}} = -\frac{N_{21}}{N_{11}} \frac{12\pi}{5l k_0} \frac{1}{n^2 - 1}. \quad (18б)$$

Сумма (6а) становится теперь двучленной. Её можно записать в виде

$$X^{(2)} = -2\pi i A_{11} \psi_{11} \left(1 + \frac{A_{21} \psi_{21}}{A_{11} \psi_{11}} \right), \quad (19)$$

где ψ_{11} и ψ_{21} означают асимптотические выражения из (8) для соответствующих l, m . Далее имеем:

$$\frac{\psi_{21}}{\psi_{11}} = \frac{N_{21} P_3^1 \Gamma(-n+2)}{N_{11} P_1^1 \Gamma(-n+3)} = \frac{N_{21}}{N_{11}} \frac{3 \cos \vartheta}{-n+2}. \quad (19a)$$

Угловая зависимость функции ψ_{11} , стоящей множителем при скобках в (19), имеет вид:

$$\psi_{11} \sim \sin \vartheta \cos \varphi. \quad (19b)$$

Подставляя (18б), (19а), (19б) в (19), находим:

$$X = \frac{1}{2} X^{(2)} \sim \sin \vartheta \cos \varphi \left[1 + \left(\frac{N_{21}}{N_{11}} \right)^2 \frac{36\pi}{5\lambda k_0} \frac{\cos \vartheta}{(n^2-1)(n-2)} \right]. \quad (20)$$

Для определения нормировочных множителей необходимо обратиться к гл. II, § 8. Из выписанного там равенства (12) следует:

$$\left(\frac{N_{21}}{N_{11}} \right)^2 = \frac{5}{3} \frac{2!}{3!} \left| \frac{\Gamma(n+3)}{\Gamma(n+2)} \right|^2 = \frac{5}{9} |n+2|^2.$$

Последнее значение подставим в (20) и перейдём к $|X|^2$. При этом поправочный член с $\cos \vartheta$ необходимо учесть лишь в первом приближении. Множитель при $\cos \vartheta$ в скобках будет равен (величина n чисто мнимая и, следовательно, n^2 вещественно):

$$\frac{4\pi}{\lambda k_0} \frac{|n+2|^2}{n^2-1} \left(\frac{1}{n-2} + \frac{1}{-n-2} \right) = \frac{16\pi}{\lambda k_0} \frac{1}{1+|n|^2}. \quad (20a)$$

Поэтому из (20) получается:

$$|X|^2 \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \left(1 + \frac{16\pi}{\lambda k_0} \frac{\cos \vartheta}{1+|n|^2} \right). \quad (21)$$

Последнее выражение можно ещё упростить. Прежде всего ввиду равенства $n = Z/\lambda k_0 a$ имеем:

$$\frac{1}{k_0} \frac{1}{1+|n|^2} = \frac{k_0}{\left(\frac{Z}{a} \right)^2 + k_0^2}. \quad (21a)$$

Если мы учтём, что работа выхода $|W_0|$ для водорода равна $e^2 Z^2/2a$, то (5а) можно написать в виде:

$$k_0^2 + \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{Z^2}{a} = \frac{4\pi m v}{\hbar}. \quad (21b)$$

Учитывая, что $(me^2/\hbar^2) = (1/a)$ и $v = (c/\lambda)$, откуда получим:

$$\left(\frac{Z}{a} \right)^2 + k_0^2 = \frac{4\pi m c}{\lambda \hbar}. \quad (21b)$$

При учёте (21а,в) множитель при $\cos \vartheta$ в (21) равен

$$\frac{4k_0 \hbar}{m c} = 4 \frac{v}{c} = 4\beta, \quad (21r)$$

так как на основании соотношений де Бройли $k_0 \hbar$ равно импульсу $m v$. Величина β относится к скорости освобождённого фотозлектрона.

Как и в случае мягкого излучения, плотность $|u|^2$ и интенсивность эмиссии электронов J пропорциональны $|X|^2$. Поэтому на основании (21) и (21г) окончательно получим:

$$J \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi (1 + 4\beta \cos \vartheta). \quad (22)$$

Жёсткое излучение в противоположность мягкому [равенство (16) в согласии с (1.3)] даёт некоторое отклонение фотоэлектронов вперёд по направлению падающего излучения. Это отклонение электронов вперёд определяется поправочным членом с β . Для лучшего уяснения читателю полезно ещё раз вернуться к рис. 26 в § 1.

В заключение сделаем несколько методических замечаний.

а) Приведённые вычисления выполнены на основании нерелятивистских формул и поэтому справедливы для не слишком жёсткого излучения (не слишком больших β). Это видно уже из того, что для $\beta > \frac{1}{4}$ на основании равенства (22) должна была бы существовать область $\cos \vartheta < -\frac{1}{4}\beta$, в которой величина J была бы отрицательной, что является, конечно, физически бессмысленным.

б) Проведённое вычисление с самого начала было специализировано для K -оболочки. Для L -оболочки (см. § 6) отклонение электронов вперёд носит более сложный характер. Также не имеет больше места пропорциональность эмиссии величине $\cos^2 \varphi$. Эта пропорциональность основывалась на том, что в вычислениях появились только первые присоединённые сферические функции P_l^1 .

в) Вычисления проводились с собственными функциями основного состояния водорода (при Z -кратном заряде ядра), однако они были распространены на K -оболочку любых атомов. В последнем случае надо радиус атома водорода a заменить радиусом K -оболочки и работу выхода $|W_0|$ водорода заменить работой ионизации K -оболочки. То обстоятельство, что в окончательной формуле (22) константы атома водорода a , $|W_0|$ отсутствуют, а вместо них входит скорость освобождённого электрона, даёт дополнительное оправдание перенесения результатов, полученных в случае атома водорода, на любые атомы.

§ 3. ОБСУЖДЕНИЕ ОТКЛОНЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ВПЕРЁД. РАЗРЕШЕНИЕ ОТНОСЯЩЕГОСЯ СЮДА ПАРАДОКСА

Из последней формулы непосредственно следует, что с увеличением жёсткости излучения (т. е. с увеличением $h\nu$, а поэтому и с увеличением β) максимум фотоэмиссии смещается вперёд. Действительно, формула (2.22) даёт для положения этого максимума:

$$\frac{dJ}{d\vartheta} = \cos^2 \varphi \frac{d}{d\vartheta} (\sin^2 \vartheta + 4\beta \sin^2 \vartheta \cos \vartheta) = 0.$$

Отсюда следует, если после дифференцирования положить в поправочном члене с β , как и в случае мягкого излучения, $\cos \vartheta = 0$, $\sin \vartheta = 1$, что

$$\cos \vartheta_{\text{макс}} = 2\beta > 0, \quad \vartheta_{\text{макс}} = \frac{\pi}{2} - 2\beta. \quad (1)$$

Можно ввести понятие «полуконуса», полезного при практическом подсчёте путей фотоэлектронов в камере Вильсона. Этот «полуконус» определяется как круговой конус, описанный вокруг направления $\vartheta = 0$ с таким углом

раствора ϑ_k , чтобы в нём была заключена как раз половина всех испущенных электронов. Следовательно, должно быть:

$$\int_0^{\vartheta_k} J \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \int_{\vartheta_k}^{\pi} J \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi.$$

Вычисление на основании (2.22) даёт следующее значение для ϑ_k , если пренебречь высшими степенями $\cos \vartheta_k$ и опять положить в поправочном члене с $\beta \sin \vartheta = 1$, $\cos \vartheta = 0$:

$$\cos \vartheta_k = \beta, \quad \vartheta_k = \frac{\pi}{2} - \beta. \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует, что боковая поверхность «полуконуса» проходит в середине между $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ и $\vartheta = \vartheta_{\text{макс}}$. Это обстоятельство отмечено на рис. 26.

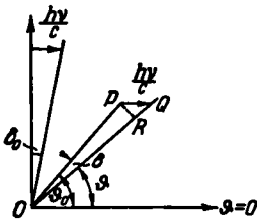


Рис. 28. Элементарное толкование механизма смещения распределения электронов вперёд: сложение первоначального импульса фотозлектрона с импульсом $\frac{h\nu}{c}$ светового кванта.

В качестве физической причины этого отклонения электронов вперёд в § 1 указывалось световое давление или, что то же самое, импульс $h\nu/c$ падающего излучения. Получающееся за счёт этого отклонение можно вычислить элементарно¹⁾.

Представим себе, что какой-либо из фотозлектронов без учёта светового давления двигался бы под углом ϑ_0 к падающему излучению. Его импульс OP (рис. 28) при сложении с импульсом $PQ = \frac{h\nu}{c}$ падающего света даёт результирующий импульс OQ , который определяется направлением ϑ и имеет величину $m\vartheta$, которая должна согласоваться с уравнением Эйнштейна. Благодаря этому направление первоначального импульса несколько отклоняется вперёд на угол δ , который определяется из треугольника POR :

$$\sin \delta = \frac{h\nu}{c} \frac{\sin \vartheta}{m\nu - \frac{h\nu}{c} \cos \vartheta},$$

или в достаточном приближении (δ считается малой величиной):

$$\delta = \delta_0 \sin \vartheta, \quad \delta_0 = \frac{h\nu}{m\nu c}, \quad (3)$$

где δ_0 означает отклонение фотозлектрона, первоначально двигавшегося под углом $\vartheta_0 = \frac{\pi}{2}$ (см. рис. 28).

Далее на основании рисунка и равенства (3) имеем:

$$\left. \begin{aligned} \vartheta_0 &= \vartheta + \delta = \vartheta + \delta_0 \sin \vartheta, \\ d\vartheta_0 &= d\vartheta (1 + \delta_0 \cos \vartheta), \\ \sin \vartheta_0 &= \sin \vartheta \cos \delta + \cos \vartheta \sin \delta = \sin \vartheta + \delta \cos \vartheta = \sin \vartheta (1 + \delta_0 \cos \vartheta), \\ \sin^2 \vartheta_0 \, d\vartheta_0 &= \sin^2 \vartheta \, d\vartheta (1 + \delta_0 \cos \vartheta)^2 = \sin^2 \vartheta \, d\vartheta (1 + 4\delta_0 \cos \vartheta). \end{aligned} \right\} \quad (3a)$$

1) Близкое вычисление см. E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. 121, 129 (1928).

Число фотоэлектронов dN , испущенных в телесный угол между ϑ_0 и $\vartheta_0 + d\vartheta_0$, φ и $\varphi + d\varphi$, при условии отсутствия светового давления будет равно

$$dN = J_0 \sin \vartheta_0 d\vartheta_0 d\varphi.$$

Здесь величина J_0 есть удельная интенсивность фотоэмиссии (интенсивность на единицу пространственного угла) «без светового давления», даваемая выражением (2.16). Следовательно, принимая во внимание (3а), найдём:

$$dN = \sin^3 \vartheta_0 \cos^2 \varphi d\vartheta_0 d\varphi = \sin^3 \vartheta \cos^2 \varphi (1 + 4\delta_0 \cos \vartheta) d\vartheta d\varphi. \quad (4)$$

Это есть число электронов, отклонившихся в телесный угол между ϑ и $\vartheta + d\vartheta$, φ и $\varphi + d\varphi$ благодаря световому давлению. Если через J обозначить удельную интенсивность фотоэмиссии «со световым давлением», то мы должны иметь:

$$dN = J \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (4a)$$

Сравнение (4) и (4a) даёт:

$$J = \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi (1 + 4\delta_0 \cos \vartheta). \quad (5)$$

Равенство (5) имеет ту же форму, что и (2.22), но коэффициент при $\cos \vartheta$ в этих равенствах различен.

На основании (3) и закона Эйнштейна в записи (2.3) имеет место равенство

$$4\delta_0 = 4 \frac{E_{\text{кин}}}{m v c} \left(1 + \frac{|W_0|}{E_{\text{кин}}} \right) = 2 \frac{v}{c} \left(1 + \frac{|W_0|}{E_{\text{кин}}} \right).$$

Для не слишком мягкого излучения (не для видимого света) $E_{\text{кин}} \gg W_0$. Поэтому с хорошим приближением в качестве коэффициента при $\cos \vartheta$ в (5) может быть взята величина

$$2 \frac{v}{c} = 2\beta.$$

Соответствующий коэффициент в (2.22) был равен 4β . Отклонение, вычисленное на основании волновой механики, в два раза больше того, которого следовало бы ожидать на основании элементарного учёта светового давления.

Это удвоение отклонения после его доказательства соответствующими опытами (стр. 373) рассматривалось как парадокс. Этот парадокс разъясняется, если представление о сложении импульса излучения с импульсом фотоэлектрона дополнить волномеханическими соображениями.

Закон Эйнштейна учитывает лишь закон сохранения энергии при фотоэффекте и на основании этого определяет лишь величину импульса вылетающего электрона или, что то же самое, величину волнового числа k . Мы потребуем теперь, чтобы наряду с законом сохранения энергии удовлетворялся и закон сохранения импульса. Поэтому фотоэлектрон должен иметь начальный импульс $\hbar k_0$, который, складываясь с импульсом $\hbar v/c$ падающего излучения, даёт результирующий импульс $\hbar k$ вылетающего электрона. Следовательно, должны иметь место равенства:

$$k_0 + \kappa = k, \quad k_0 = k - \kappa. \quad (6)$$

В этих равенствах κ имеет величину $2\pi/\lambda$ (импульс светового кванта, делённый на \hbar) и направление падающего излучения, Поэтому необходимо

исследовать распределение импульсов в начальном состоянии ψ_0 атома ¹⁾ и установить, как часто в этом состоянии встречается данный импульс $\hbar k_0$.

Исследование этого распределения можно произвести на основании теории преобразований (гл. III, § 7). Там в равенствах (1) — (4) было показано, что амплитуда вероятности для собственного значения π импульса [там обозначенная $v(\pi)$] получается из амплитуды вероятности нахождения частицы [там обозначенной через $u(q)$] по способу Фурье, так как собственные функции импульса [обозначенные там через $S_\pi(q)$] являются экспоненциальными функциями. Обобщая эти соображения на трёхмерный случай, рассматривая вместо импульса π пропорциональное ему волновое число k и вместо u, v беря ψ_0, w [$w(k)$ — амплитуда вероятности распределения волновых чисел], мы из равенства (7.3) получим (при подходящем выборе нормирующего множителя):

$$\psi_0 = \int w(k_0) e^{i(k_0 r)} dk_0, \quad (7)$$

$$w(k_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \psi_0(r) e^{-i(k_0 r)} d\tau. \quad (7a)$$

При выборе ψ_0 в виде (2.10) интеграл в (7a) может быть вычислен непосредственно в полярных координатах r, Θ, Φ , причём ось $\Theta = 0$ удобно направить вдоль вектора k_0 . Вводя обозначение $N = -\pi^{-1/2} (Z/a)^{1/2}$, найдём:

$$\begin{aligned} w(k_0) &= \frac{N}{4\pi^3} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr e^{-\left(\frac{Z}{a} + ik_0 \cos \theta\right)r} = \\ &= \frac{N}{2\pi^3} \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\left(\frac{Z}{a} + ik_0 \cos \theta\right)^3} = \frac{NZ}{\pi^2 a} \frac{1}{\left(\frac{Z^2}{a^2} + k_0^2\right)^{3/2}}. \end{aligned}$$

При учёте равенств (6) для вероятности волнового числа k_0 в начальном состоянии ψ_0 атома получается, таким образом, следующее выражение:

$$w^2 \sim \frac{1}{\left(\frac{Z^2}{a^2} + |k - \pi|^2\right)^3}. \quad (8)$$

Обозначая угол между вектором u и k через θ , можно переписать выражение, стоящее в скобках в знаменателе, в виде:

$$\frac{Z^2}{a^2} + k^2 - 2\pi k \cos \theta + \pi^2. \quad (8a)$$

Положив $x = \frac{2\pi}{\lambda}$ [см. выше (6)], $k = \frac{mv}{\hbar}$ (соотношение де-Бройля), $\frac{Z^2}{a^2} + k^2 = \frac{4\pi mc}{\lambda \hbar}$ [равенство (2.21v) в котором мы теперь должны написать k вместо k_0],

¹⁾ Строго говоря, следовало бы принять во внимание также распределение импульсов в конечном состоянии, а не рассматривать импульс конечного состояния, как это мы сделаем, как строго определённый. Строго определённый импульс означает: плоская волна с волновым вектором k . Следовательно, в тексте собственные функции конечного состояния заменяются плоскими волнами $\exp\{i(kr)\}$. То обстоятельство, что, несмотря на такое упрощение, величина фотоэффекта для K -оболочки получается правильной, показано уже Френкелем, Phys. Rev. 38, 309 (1931). По-другому обстоит дело в L -оболочке; см. примечание 1, стр. 406.

вместо (8а) получим:

$$\frac{4\pi mc}{\lambda h} \left(1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta + \frac{\pi}{\lambda} \frac{h}{mc} \right). \quad (8б)$$

Последний член в скобках, обозначаемый в дальнейшем через γ , переписывается в более простом виде, если ввести туда комптоновскую длину волны $\lambda_0 = h/m_0c$:

$$\gamma = \frac{\lambda_0 m_0}{2\lambda} = \frac{\lambda_0}{2\lambda} \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (8в)$$

Таким образом, (8б) принимает вид:

$$\frac{4\pi mc}{\lambda h} (1 - \beta \cos \vartheta + \gamma). \quad (8г)$$

Подставляя последнее выражение в (8), для искомой вероятности с точностью до множителя, не зависящего от ϑ , получим:

$$w^2 \sim \frac{1}{(1 - \beta \cos \vartheta + \gamma)^4}. \quad (9)$$

Принимая во внимание связь между k , κ и k_0 [равенство (6)] и связь w с распределением импульсов в начальном состоянии атома [равенство (7а)], величину w^2 можно назвать вероятностью того, что, рассматривая заданное направление ϑ , φ фотоэмиссии, мы найдём, что закон сохранения импульса выполняется. Эту вероятность необходимо ещё умножить на вероятность вырывания электрона под действием поля падающей волны. Очевидно, что эта вероятность зависит лишь от электрического вектора поля E , а именно, от составляющей этого вектора в направлении ϑ , φ , которая при сделанном выборе координатной системы равна $|E| \sin \vartheta \cos \varphi$. Далее очевидно, что эта вероятность зависит не от самой этой составляющей, а от её квадрата, т. е. от интенсивности в данном направлении. Следовательно, обозначая «вероятность вырывания электрона» через W^2 , имеем:

$$W^2 \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi. \quad (10)$$

Наконец, из (9) и (10) получается следующее выражение для вероятности фотоэмиссии в направлении ϑ , φ :

$$J \sim w^2 W^2 \sim \frac{\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{(1 - \beta \cos \vartheta + \gamma)^4}. \quad (11)$$

Эта формула согласуется с (1.4), если только опустить поправочный член γ , и, как было отмечено, переходит в более привычную формулу (1.3):

$$J \sim \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi (1 + 4\beta \cos \vartheta), \quad (11а)$$

если произвести разложение по степеням β и ограничиться первой степенью β , что оправдывается степенью точности проведённого нерелятивистского расчёта.

Теперь разрешение указанного выше парадокса становится очевидным. При элементарном расчёте мы, правда, учитывали закон сохранения импульса (в волновых числах $k + \kappa = k_0$), однако мы не принимали во внимание вероятности w^2 , с которой некоторый импульс k представлен в первоначальном состоянии атома; последовательный учёт последнего обстоятельства, схематически представляемого соотношением $J = w^2 W^2$, ведёт к удвоению отклонения электронов по сравнению с тем, которое получается из элементарных рассуждений.

Вычислим, наконец, величину отдачи, которую испытывает атом благодаря отклонению электронов вперёд, т. е. благодаря тому обстоятельству, что в среднем больше электронов испускается вперёд, чем назад. Очевидно, эта отдача (ввиду характера зависимости фотоэмиссии от угла ϑ) направлена навстречу падающему излучению. Следовательно, необходимо найти составляющую импульсов испущенных электронов на направление падающего излучения. Эта составляющая для отдельного электрона равна $m v \cos \vartheta$, и, следовательно, среднее значение этой величины равно

$$m v \frac{\int J \cos \vartheta d\omega}{\int J d\omega}. \quad (12)$$

На основании (11a) с $x = \cos \vartheta$ имеем:

$$\int d\omega = \pi \int_{-1}^{+1} (1 - x^2)(1 + 4\beta x) dx = \frac{4\pi}{3}$$

(член, учитывающий отклонение электронов вперёд, не даёт добавки к этой величине) и

$$\int J x d\omega = \pi \int_{-1}^{+1} (1 - x^2)(1 + 4\beta x) x dx = \frac{16}{15} \pi \beta$$

(в этом случае, наоборот, лишь член, учитывающий отклонение электронов вперёд, даёт вклад в интеграл). Отсюда выражение (12) равно

$$\frac{4}{5} m v \beta = \frac{8}{5} \frac{m v^2}{2c} = \frac{8}{5} \frac{h\nu}{c}. \quad (12a)$$

причём последний переход сделан на основании закона Эйнштейна при пренебрежении работой выхода W_0 по сравнению с $h\nu$.

Для того чтобы найти импульс отдачи, необходимо найти излишек импульса испущенных электронов по сравнению с импульсом падающего излучения. Этот излишек равен

$$\frac{8}{5} \frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu}{c} = \frac{3}{5} \frac{h\nu}{c}.$$

Это и есть величина отдачи, которую в среднем испытывает атом. Можно сказать так: в возбуждённом фотоэлектрически газе по направлению, противоположному направлению падающего излучения, дует атомарный ветер; сила этого ветра пропорциональна жёсткости падающего излучения.

§ 4. ФОТОЭФФЕКТ В К-ОБОЛОЧКЕ С ПОЛНЫМ УЧЁТОМ ЗАПАЗДЫВАНИЯ В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

«Множитель запаздывания» $\exp(2\pi i x/\lambda)$ в (2.2) получается за счёт конечной скорости распространения падающего излучения и играет тем большую роль, чем более коротковолновым является это излучение. В дальнейшем этот множитель мы будем писать в виде:

$$e^{i(\mathbf{x}r)}, \quad |\mathbf{x}| = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (1)$$

где через \mathbf{x} обозначен волновой вектор падающего излучения. До сих пор, в § 2, мы учитывали лишь один или два члена разложения этого множителя

в ряд. Теперь мы учтём этот множитель полностью, пользуясь методом Заутера и Фишера (см. ссылку на стр. 374).

Заутер вёл расчёт с теми же собственными функциями в полярных координатах, которые использованы нами в § 2, Фишер воспользовался собственными функциями в параболических координатах, аналогичными применённым нами при рассмотрении эффекта Штарка. Мы здесь получим те же результаты, что и эти авторы, воспользовавшись более подходящими для этой задачи собственными функциями (II. 9.31), которые оказались весьма удобными при рассмотрении задачи рассеяния в гл. V, § 8,Б, а именно:

$$\psi = e^{i(kr)} L_n(\rho), \quad \left. \begin{array}{l} \rho = l[kr - (kr)], \\ n = \frac{Z}{ika} = \frac{aZ}{i\beta}. \end{array} \right\} \quad (2)$$

В случае задачи рассеяния вектор k являлся волновым вектором плоской волны, падающей со стороны отрицательного направления и вследствие наличия рассеяния интерферировавшей со сферической волной, возникающей в результате рассеяния¹⁾. В случае же фотоэффекта нам необходимо получить волну, расходящаяся составная часть которой асимптотически состоит из плоской волны и, следовательно, не интерферирует с расходящейся сферической волной. Это условие будет соблюдено, если в (2) одновременно произвести замену

$$k \text{ на } -k \text{ и } l \text{ на } -l. \quad (2a)$$

Благодаря этому отрицательное направление переходит в положительное и вместо расходящейся сферической волны получается сходящаяся (к атому) сферическая волна. Следовательно, со стороны положительного направления $+k$ мы имеем плоскую уходящую волну, которая соответствует наглядному представлению испущенных электронов (сходящаяся сферическая волна в этом случае нам не мешает). При проведении указанной замены первоначальное представление (2) при соответствующей нормировке переходит в

$$\psi = N e^{i(kr)} L_{-n}(-\rho), \quad \left. \begin{array}{l} \rho = l[kr + (kr)], \\ n = \frac{Z}{ika} = \frac{aZ}{i\beta}. \end{array} \right\} \quad (3)$$

Если мы будем придавать k всевозможные направления и величину, то получим ∞^3 -кратную систему собственных функций, которая охватывает все состояния атома водорода с непрерывным спектром собственных значений. Сравним эту систему с системой собственных функций непрерывного спектра в полярных координатах:

$$\psi = N R_l(r, k) P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (3a)$$

Дискретному множеству угловых квантовых чисел l, m этой системы соответствует непрерывное множество направлений волнового числа k ; величина

¹⁾ Благодаря интерференции между сферической и плоской волнами в положительном направлении, т. е. сзади атома, возникают колебания интенсивности, которые являются аналогом явления Пуассона обычной оптики (максимумы и минимумы сзади круглого экрана). На основании принятого в (2a) изменения направлений соответствующая интерференция между сходящейся сферической волной и падающей плоской волной имеет место в отрицательном направлении, т. е. перед атомом. Последнее обстоятельство для нас несущественно, так как нас интересует плоская излучённая волна. См. O. Scherzer, Ann. d. Phys. 13, 137 (1932).

энергии в обоих случаях представлена посредством непрерывно изменяющейся величины k . Обе системы функций (3) и (3а) ортогональны, обе системы при добавлении собственных функций дискретного спектра составляют полную систему собственных функций. Следовательно, система (3), так же как использованная в § 2 система (3а), может быть использована для расчёта методами теории возмущений.

Основываясь на сказанном и используя новые собственные функции, перепишем формулы начала § 2. Пусть α, β будут полярные углы вектора k , которые, так же как и углы ϑ, φ радиуса-вектора r , отнесены к полярной оси, совпадающей с направлением вектора k . Вместо равенства (2.6а) мы имеем:

$$X = -2\pi i \int d\omega_{\alpha\beta} A(\alpha, \beta, k) \psi_{\alpha\sigma}(\alpha, \beta, k), \quad (4)$$

причём прежняя сумма по l, m заменена интегралом по $d\omega_{\alpha\beta}$ с $d\omega_{\alpha\beta} = \sin \alpha d\alpha d\beta$. Как в $\psi_{\alpha\sigma}$, так и в аргументе $A k$ есть величина волнового числа, соответствующая точке взятия вычета на рис. 27 [обозначенная там через k_0 и определяемая законом Эйнштейна (2.5а)]. Следовательно, интегрирование в (4) производится не по всей первоначальной ∞^3 -кратной системе собственных функций, но лишь по ∞^3 -кратной системе собственных функций при постоянной величине k .

Верхние индексы при X и ψ из равенства (2.6а) в равенстве (4) опущены. Надо обратить внимание на то, что благодаря методу интегрирования, изложенному на стр. 377, сходящаяся волна исключается из рассмотрения и поэтому под $\psi_{\alpha\sigma}$ в (4) следует понимать лишь часть, соответствующую расходящейся волне.

Для того чтобы получить новое значение A , вернёмся обратно к равенству (2.2а). Там направление y было направлением поляризации падающего света. Это направление теперь мы обозначим через p , так как в качестве направления падающей волны мы взяли общее направление k . Очевидно, при этом должно быть

$$(kp) = 0. \quad (4a)$$

В соответствии с этим вместо прежнего выражения $\frac{\partial \psi_0}{\partial y}$ напомним $(p \text{ grad } \psi_0)$ и положим

$$A = (pA). \quad (4b)$$

Используя «множитель запаздывания» в форме (1) и характеризуя собственные функции переменными α, β, k вместо прежнего W , мы из (2.2а) находим:

$$A(\alpha, \beta, k) = \int \psi^*(\alpha, \beta, k) e^{i(kr)} \text{grad } \psi_0 d\tau. \quad (5)$$

Здесь операцию grad необходимо применить к точке интегрирования r , что в дальнейшем будет отмечаться обозначением grad_r . Функция ψ^* является сопряжённой к собственной функции (3):

$$\psi^* = N e^{-i(kr)} L_n(p).$$

Следовательно, написанное более подробно равенство (5) гласит:

$$A(\alpha, \beta, k) = N \int r^2 dr \int d\omega e^{-i(kr)} L_n(p) e^{i(kr)} \text{grad}_r \psi_0, \quad (6)$$

где

$$d\omega = d\omega_{\vartheta, \varphi} = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

Определим теперь предельное значение функции ψ_{∞} , входящей в равенство (4). Для этого необходимо вспомнить асимптотическое выражение для L , которое было дано в (II.7.25) [вклад из (II.7.26) исчезает, так как он соответствует падающей волне]:

$$L_n(\rho) \rightarrow \frac{(-\rho)^n}{\Gamma(n+1)}, \quad \text{поэтому} \quad L_{-n}(-\rho) \rightarrow \frac{\rho^{-n}}{\Gamma(1-n)}.$$

Следовательно, на основании (3) имеем:

$$\psi_{\infty} \rightarrow N e^{i(kr)} \frac{\rho^{-n}}{\Gamma(1-n)} \quad \text{для} \quad r \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Необходимо установить зависимость этой величины от углов α , β и ϑ , φ , характеризующих направление векторов k и r . Очевидно, имеем:

$$\left. \begin{aligned} (kr) = kr \cos \Theta, \quad \cos \Theta = \cos \vartheta \cos \alpha + \sin \vartheta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta), \\ \text{на основании (3)} \quad \rho = lkr(1 + \cos \Theta). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Однако в (4) имелось в виду не полное ψ_{∞} , но только часть, связанная с расходящейся волной. В (7) этому случаю соответствуют положительные значения (kr) . Поэтому мы должны добавить условие $(kr) > 0$, т. е. на основании (8)

$$\cos \Theta > 0, \quad (8a)$$

что необходимо опять сравнить с рис. 27, где члены с отрицательным знаком в показателе степени $l(kr)$, которые соответствуют сходящейся волне, благодаря методу интегрирования автоматически исключаются.

Подставляя (7) и (8) в (4), находим:

$$X = \frac{-2\pi i N}{\Gamma(1-n)} \int \rho^{-n} A(\alpha, \beta, k) e^{i kr \cos \Theta} d\omega_{\alpha\beta}. \quad (9)$$

Для вычисления (9) мы воспользуемся «методом стационарной фазы» Кельвина, который во многих случаях можно применять вместо математически более строгого «метода перевала». Метод стационарной фазы состоит в следующем: если в интеграле имеется бесконечно быстро осциллирующая функция [в нашем случае $\exp(i kr \cos \Theta)$], то вклад в значение интеграла дают лишь те точки, в которых изменение фазы осцилляции бесконечно замедляется (фаза «стационарная»). Тогда «медленно изменяющаяся» часть подинтегрального выражения можно заменить её значением в этих критических точках и провести лишь интегрирование бесконечно быстро изменяющейся функции.

В нашем случае двойного интеграла по α и β критические точки найдутся из условий:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \cos \Theta}{\partial \alpha} = -\cos \vartheta \sin \alpha + \sin \vartheta \cos \alpha \cos(\varphi - \beta) = 0, \\ \frac{\partial \cos \Theta}{\partial \beta} = +\sin \vartheta \sin \alpha \sin(\varphi - \beta) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (9a)$$

Из второго условия следует:

$$\sin(\varphi - \beta) = 0, \quad \beta = \varphi \quad \text{или} \quad \beta = \varphi \pm \pi. \quad (9b)$$

Из первого находим:

$$\sin(\vartheta \mp \alpha) = 0, \quad \alpha = \vartheta \quad \text{или} \quad \alpha = \pi - \vartheta. \quad (9в)$$

Для $\alpha = \vartheta$, $\beta = \varphi$ получаем, что $\cos \Theta = 1$, для $\alpha = \pi - \vartheta$, $\beta = \varphi \pm \pi$ имеем $\cos \Theta = -1$. Вследствие дополнительного условия (8а) необходимо принять во внимание лишь первое значение Θ . Следовательно, в медленно изменяющейся части подинтегрального выражения надо положить $\alpha = \vartheta$, $\beta = \varphi$ и вынести её из-под знака интеграла. Таким образом, получается:

$$X = \frac{-2\pi i N}{\Gamma(1-n)} (2lkr)^{-n} A(\vartheta, \varphi, k) \Omega_0, \quad (10)$$

$$\Omega_0 = \int e^{ikr \cos \vartheta} d\omega_{\alpha\beta}. \quad (10a)$$

Вместо переменных интегрирования α, β введём другие, более удобные переменные Θ, Φ и, следовательно, вместо $d\omega_{\alpha\beta}$ введём:

$$d\omega_{\Theta\Phi} = \sin \Theta d\Theta d\Phi.$$

Тогда, вводя обозначение $\xi = \cos \Theta$, будем иметь (учитывая, что предел интегрирования равен $\xi = l\infty$; ср. с замечанием в конце этого параграфа):

$$\Omega_0 = \int_0^{2\pi} d\Phi \int_{l\infty}^1 d\xi e^{ikr\xi} = 2\pi \frac{e^{ikr}}{ikr}. \quad (11)$$

Записывая $(2lkr)^{-n}$ в экспоненциальной форме, отсюда найдём:

$$X = \frac{-(2\pi)^{3/2} N}{\Gamma(1-n)} e^{-\frac{\pi}{2}|n|} A(\vartheta, \varphi, k) \frac{e^{i(kr + |n| \ln 2kr)}}{kr}. \quad (12)$$

Теперь остаётся лишь определить коэффициент $A(\vartheta, \varphi, k)$. Посредством равенства (4б) он выражается через вектор $A(\vartheta, \varphi, k)$, последний же определён при помощи (6). Эта формула упрощается, если с учётом значения ψ_0 в (2.10) равенство

$$e^{i(kr)} \text{grad}_r \psi_0 = -\frac{Z}{a} \frac{r}{r} \psi_0 e^{i(kr)} \quad (13)$$

сравнить с равенством

$$\psi_0 \text{grad}_x e^{i(kr)} = ikr \psi_0 e^{i(kr)}. \quad (13a)$$

Из сравнения следует, что

$$e^{i(kr)} \text{grad}_r \psi_0 = \frac{Z}{a} \frac{l}{r} \psi_0 \text{grad}_x e^{i(kr)}. \quad (14)$$

Поэтому из (6), вынося операцию градиента по x за знак интеграла, получим:

$$A = -l \frac{Z}{a} N N_0 \text{grad}_x B, \quad N_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{1/2} \quad [\text{ср. (2.10)}], \quad (15)$$

где введено обозначение:

$$B = \int r dr e^{-\frac{Z}{a} r} \int d\omega e^{-i(k-z, r)} L_n(\rho). \quad (15a)$$

В это выражение мы вместо функции L внесём её представление (II.7.14), которое после подстановки $z = \rho x$ гласит:

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2\pi i} e^{\rho} \oint x^n (x-1)^{-n-1} e^{-\rho x} dx. \quad (15б)$$

Следовательно, учитывая значение ρ из (3), имеем:

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2\pi i} e^{i(kr + (kr)l)} \oint x^n (x-1)^{-n-1} e^{-i(kr + (kr)l)x} dx. \quad (15в)$$

Поэтому выражение (15а) после перемены порядка интегрирования переписывается следующим образом:

$$B = \frac{1}{2\pi i} \oint x^n (x-1)^{-n-1} dx \int r dr e^{-\frac{z}{a} r + ik(1-\omega)r} \Omega, \quad (16)$$

$$\Omega = \int d\omega e^{i(x-k\omega, r)} = \int d\omega e^{i(Kr)}. \quad (16a)$$

Введённый в (16а) вектор

$$K = \kappa - kx, \quad (16б)$$

так же как и в предыдущих аналогичных вычислениях (см. стр. 338), берётся в качестве оси полярной системы координат с углами Θ , Φ , так что $(Kr) = Kr \cos \Theta$ и

$$\Omega = \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\pi} \sin \Theta d\Theta e^{iKr \cos \Theta} = 2\pi \frac{e^{iKr} - e^{-iKr}}{iKr}. \quad (16в)$$

Вводя, далее, обозначение

$$K_0 = \frac{z}{a} - ik(1-x), \quad (16г)$$

мы видим, что интеграл по r в (16) переходит в

$$\frac{2\pi}{iK} \left(\int_0^{\infty} e^{(-K_0 + iK)r} dr - \int_0^{\infty} e^{(-K_0 - iK)r} dr \right) = \frac{4\pi}{K_0^2 + K^2}. \quad (16д)$$

Из (16б) и (16г) находим:

$$K_0^2 + K^2 = \left(\frac{z}{a} - ik \right)^2 + x^2 + 2 \left\{ ik \left(\frac{z}{a} - ik \right) - (\kappa k) \right\} x,$$

причём член с x^2 выпадает. Поэтому можно положить:

$$\left. \begin{aligned} K_0^2 + K^2 &= c + bx = b(x - x_0), & x_0 &= -\frac{c}{b}, \\ c &= \left(\frac{z}{a} - ik \right)^2 + x^2, & b &= 2 \left[ik \left(\frac{z}{a} - ik \right) - (\kappa k) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (16е)$$

Величину b можно записать и в другом виде:

$$b = 2 \left[ik \left(\frac{z}{a} - ik \right) - \kappa k \cos \vartheta \right]. \quad (16ж)$$

Окончательно интеграл (16) преобразуется к следующему виду:

$$B = \frac{2}{ib} \oint \frac{x^n (x-1)^{-n-1}}{x-x_0} dx. \quad (17)$$

Так как путь интегрирования идёт вокруг точек 0, 1 и подынтегральное выражение на бесконечности исчезает как $1/x^2$, то интегрирование сразу выполняется взятием вычета в точке $x = x_0$. В результате получается:

$$B = -\frac{4\pi}{b} x_0^n (x_0 - 1)^{-n-1} = 4\pi \frac{c^n}{(c+b)^{n+1}}. \quad (17а)$$

Теперь, как это указано в (15), необходимо взять градиент B по x :

$$\text{grad } B = +4\pi \frac{c^{n-1}}{(c+b)^{n+2}} [n(c+b) \text{grad } c - (n+1)c \text{grad } (c+b)]. \quad (18)$$

На основании (16е) имеем:

$$\text{grad } c = 2\kappa, \quad \text{grad } b = -2\kappa. \quad (18a)$$

Дальнейшее вычисление упростится, если мы некоторым преобразованием сохраним умножение на единичный вектор p , предусмотренное в (4б). Именно, на основании (4а) имеем:

$$(p, \text{grad } c) = 0; \quad (p \text{ grad } b) = -2(kp). \quad (18б)$$

Следовательно, из (18) получаем:

$$(p \text{ grad } B) = 8\pi(n+1)(kp) \frac{c^n}{(c+b)^{n+2}}. \quad (19)$$

Из (16а) и (16ж) следует, что величина $(c+b)$ является вещественной величиной:

$$c+b = \frac{Z^2}{a^2} + k^2 + x^2 - 2\kappa k \cos \theta, \quad (19a)$$

в то время как c является комплексной; запишем:

$$c = |c| e^{i\tau}, \quad \text{tg } \tau = \frac{-2\kappa Z/a}{\left(\frac{Z}{a}\right)^2 + x^2 - k^2}, \quad (19б)$$

$$(p, \text{grad } B) = -\frac{8\pi(n+1)(kp)}{(c+b)^2} e^{\tau} |n| \left(\frac{|c|}{c+b}\right)^n, \quad (19в)$$

где последний множитель по абсолютной величине равен единице, так как n является чисто мнимой величиной. Поэтому из (15) и (4б) для A получается следующее значение:

$$A = -8\pi l \frac{Z}{a} N N_0 \frac{(n+1)(kp)}{(c+b)^2} e^{\tau} |n| \left(\frac{|c|}{c+b}\right)^n. \quad (20)$$

Выражение (19а) для $c+b$ нам уже встречалось раньше в (3.8а). Поэтому его значение можно взять из (3.8г) [λ_c — комтоновская длина волны]:

$$c+b = \frac{8\pi^2}{\lambda \lambda_c} (1 - \beta \cos \theta + \gamma). \quad (20a)$$

Значение величины (kp) получается сразу, если учесть, что в прямоугольной системе координат x, p, n [n — нормаль к плоскости поляризации xp] вектор k имеет следующие составляющие:

$$k \cos \theta, \quad k \sin \theta \cos \varphi, \quad k \sin \theta \sin \varphi.$$

Отсюда имеем:

$$kp = k \sin \theta \cos \varphi. \quad (20б)$$

Если (20а), (20б) подставить в (20), а (20) в (12), то, собирая все постоянные множители в коэффициент C , получим:

$$X = C \frac{\sin \theta \cos \varphi}{(1 - \beta \cos \theta + \gamma)^2} \left(\frac{|c|}{c+b}\right)^n \frac{e^{i(kr + |n| \ln 2kr)}}{r}, \quad (21)$$

$$C = -\frac{1}{2\pi l} \frac{Z}{a} N^2 N_0 \lambda^2 \lambda_c^2 \frac{n+1}{\Gamma(1-n)} e^{(\tau - \frac{\pi}{2})|n|} \quad (21a)$$

и

$$|X|^2 = \frac{|C|^2}{r^2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1 - \beta \cos \theta + \gamma)^4}. \quad (216)$$

Как уже было указано ранее (стр. 380 и 382), величина $|X|^2$ пропорциональна интенсивности J эмиссии электронов. Нам надо определить коэффициент пропорциональности между этими величинами, о котором будет речь в следующем параграфе. Для этой цели мы, исходя из равенства (2.1), полагаем там $r = \infty$. При этом член с ψ_k (собственные функции дискретного спектра) и благодаря выбору пути интегрирования также и Y исчезают. Поэтому из (2.1) получается:

$$|u|^2 = \left(\frac{e \hbar E}{m 4\pi v} \right)^2 |X|^2. \quad (22)$$

Это есть плотность фотоэлектронов в точке $r = \infty$, θ , φ . Интенсивность J фототока получится отсюда умножением на скорость электронов

$$v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (22a)$$

Следовательно, найдём:

$$J = v |u|^2 = \frac{D}{r^2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1 - \beta \cos \theta + \gamma)^4}, \quad (23)$$

что согласуется с равенством (3.11) и результатами Заутера и Фишера [равенство (1.4)]. Величина коэффициента D даётся равенством

$$D = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{e \hbar E}{m 4\pi v} \right)^2 |C|^2. \quad (24)$$

Наконец, надо сделать замечание о пределе интегрирования $\xi = l \infty$ в равенстве (11). Это значение предела интегрирования получается потому, что метод стационарной фазы следует для строгости заменить методом перевала, а согласно этому последнему методу к критической точке $\xi = 1$ мы должны приближаться со стороны мнимых ξ (направление наиболее крутого подъёма). Последнее становится особенно очевидным, если предусмотренное на рис. 27 перемещение пути интегрирования провести ранее предельного перехода $r \rightarrow \infty$.

§ 5. КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ В K -ОБОЛОЧКЕ

После того как в предыдущих параграфах были приведены количественные расчёты фотоэффекта в K -оболочке, включая расчёт всех коэффициентов, можно перейти к так называемым «истинным коэффициентам K -поглощения», т. е. к ослаблению падающего света благодаря фотоэмиссии из K -оболочки.

Прежде всего вычислим величину полного фототока для отдельного атома. Для этого необходимо (4.23) проинтегрировать по сфере большого радиуса, охватывающей атом, и добавить множитель 2, учитывающий наличие двух электронов в K -оболочке. При этом мы можем при нерелятивистском расчёте пренебречь как малой величиной γ в знаменателе (4.23), так и высшими степенями β . Поскольку при разложении в ряд по степеням β первая степень β , как легко видеть, не даёт никакого вклада в величину интеграла, мы имеем:

$$2 \int J r^2 d\omega = 2D \int \sin^2 \theta \cos^2 \varphi d\omega = \frac{8\pi}{3} D. \quad (1)$$

Так как каждый акт фотопроцесса уносит от падающего света энергию $h\nu$, то умножением (1) на $h\nu$ мы получаем обусловленное фотопроцессом ослабление света на один атом в единицу времени:

$$\frac{8\pi}{3} h\nu D. \quad (2)$$

«Коэффициент поглощения на атом» получается из (2) делением на средний поток энергии S , падающий на единицу поверхности в единицу времени. Этот поток энергии равен

$$S = \frac{c}{4\pi} \overline{E^2} = \frac{c}{8\pi} E^2 \quad (2a)$$

(E — напряжённость электрического поля, E — амплитуда колебаний падающего света). Поэтому из (2a) следует:

$$\mu_{\text{ат}} = \frac{64\pi^2 h\nu D}{3 c E^2}. \quad (3)$$

Коэффициент поглощения, рассчитанный на грамм-атом вещества, получается отсюда умножением на число Лошмидта L .

Если мы воспользуемся равенством (4.24) и положим в нём $e^2 = \alpha h c$, $\nu = c/\lambda$, то получим:

$$L\mu_{\text{ат}} = \frac{8\pi}{3} L\alpha \frac{h^2 \lambda}{c m^2} k |C|^2. \quad (4)$$

Величину $|C|^2$ надо взять из (4.21a). Используя значение $N_0 = \pi^{-1/2} (Z/a)^{1/2}$, найдём:

$$L\mu_{\text{ат}} = \frac{L\alpha h^4 k}{3\pi^2 m^2} \left(\frac{Z\lambda\lambda_e}{a}\right)^5 N^4 \frac{1 + |\pi|^2}{|\Gamma(1-n)|^2} e^{(2\pi - \pi)|n|}. \quad (5)$$

Надо определить величину нормирующего множителя N собственных функций (4.3). Для этого множителя в (II.9.32) было получено значение

$$N^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{|\pi|}{1 - e^{-2\pi|\pi|}}. \quad (5a)$$

Это значение предполагает «нормирование по шкале волновых чисел». В основу же расчётов фотозффекта было положено «нормирование в шкале энергий», как это непосредственно видно из (2.1). Из соотношений

$$W = \frac{h^2 k^2}{2m}, \quad dW = \frac{h^2}{m} k dk$$

получается, если через α, β , как и в (4.4), обозначить угловые координаты, следующее выражение для элемента объёма в пространстве волновых чисел:

$$d\omega_{\alpha\beta} k^2 dk = \frac{mk}{h^2} d\omega_{\alpha\beta} dW.$$

Поэтому, чтобы получить нормировку по шкале энергий, мы должны прежний коэффициент N^2 умножить на mk/h^2 ; следовательно,

$$N^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{|\pi|}{1 - e^{-2\pi|\pi|}} \frac{mk}{h^2}. \quad (5b)$$

Это значение надо внести в (5). Для дальнейшего упрощения выражения воспользуемся соотношением (8) из дополнения 7:

$$|\Gamma(1-n)|^2 (1 - e^{-2\pi|\pi|}) = 2\pi |\pi| e^{-\pi\pi} \quad (5в)$$

и заменим один из множителей Z/a через $k|n|$. Тогда (5) принимает вид:

$$L\mu_{\text{вт}} = \frac{L\alpha}{3\pi^3} \left(\frac{Z}{a}\right)^4 \left(\frac{\lambda\lambda_0}{2\pi e}\right)^5 k^4 \frac{|n|^3 (1 + |n|^2) e^{2\pi|n|}}{1 - e^{-2\pi|n|}}. \quad (6)$$

Далее используем равенство (2.21в), которое можно записать в виде:

$$k^3 (1 + |n|^2) = \frac{8\pi^3}{\lambda\lambda_0}, \quad (6a)$$

и умножим числитель и знаменатель для упрощения выражений в дальнейшем на e^4 (e — основание натуральных логарифмов). В результате получим:

$$\left. \begin{aligned} L\mu_{\text{вт}} &= \frac{32}{3} \left(\frac{Z}{a}\right)^4 L\alpha \frac{(\lambda\lambda_0)^5}{(2\pi e)^4} M, \\ M &= \frac{|n|^3}{1 + |n|^2} \frac{e^{4+2\pi|n|}}{1 - e^{-2\pi|n|}}. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Нас интересует значение величин вблизи границы К-поглощения. Покажем, что в этом случае множитель M близок к единице.

Вблизи границы поглощения вся энергия светового кванта используется на освобождение электрона из атома, для сообщения электрону скорости энергии не остаётся; следовательно, в этом случае $k = 0$ и $|n| = \infty$. Поэтому мы должны разложить в ряд величину M при больших значениях $|n|$. Определение τ в (4.19б) гласит:

$$\operatorname{tg} \tau = \frac{-2kZ/a}{\left(\frac{Z}{a}\right)^2 + x^2 - k^2}. \quad (7a)$$

В этом выражении можно пренебречь величиной x^2 по сравнению с $(Z/a)^2$. В самом деле, уравнение Эйнштейна для границы поглощения $\nu = \nu_0$ даёт:

$$h\nu_0 = \frac{e^2 Z^2}{2a}.$$

Отсюда, ввиду того что $h\nu_0 = hc x_0$, следует:

$$x_0 \frac{a}{Z} = \frac{1}{2} \alpha Z.$$

Поэтому у границы поглощения x^2 по сравнению с $(Z/a)^2$ имеет порядок малости $(\alpha Z)^2$. Но величинами такого порядка при нерелятивистском расчёте мы должны пренебрегать. Следовательно, (7a) упрощается и принимает вид:

$$\operatorname{tg} \tau = \frac{2|n|}{1 - |n|^2}. \quad (7б)$$

Если воспользоваться формулой

$$\operatorname{tg} \tau = \frac{2 \operatorname{tg} \tau/2}{1 - \operatorname{tg}^2 \tau/2},$$

то из (7б) без всяких пренебрежений получается:

$$\operatorname{tg} \frac{\tau}{2} = -\frac{1}{|n|}.$$

Отсюда, воспользовавшись рядом для arctg , находим:

$$\frac{\tau}{2} = -\frac{1}{|n|} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{1}{|n|^2} + \dots\right).$$

Поэтому

$$e^{4+2\pi|n|} = e^{\frac{4}{3} \frac{1}{|n|^3} + \dots} = 1 + \frac{4}{3} \frac{1}{|n|^3} + \dots \quad (7в)$$

Таким образом, из (7) для M получаем следующее разложение в ряд:

$$M = 1 + \frac{1}{3} \frac{1}{|n|^3} + \dots \quad (7г)$$

т. е. функцию, медленно изменяющуюся при больших n с предельным значением 1 для $n = \infty$. Поэтому, пренебрегая единицей по сравнению с $|n|^3$, вместо (7) найдём следующие равенства:

$$L_{\mu_{\text{вт}}} = CZ^4 \lambda^3, \quad C = \frac{32}{3e^4} La \frac{\lambda_0^3}{(2\pi a)^4}. \quad (8)$$

Сравним эти результаты с результатами экспериментов, приведёнными в т. I (IV.6.1).

Зависимость от Z и λ та же, что и там. Покажем, что и численная величина C достаточно хорошо согласуется с приведёнными там данными.

Для упрощения этого сравнения заметим, что для $\lambda_0 = h/mc$, $a = b^3/me^9$ множитель, входящий в (8), преобразуется следующим образом:

$$\frac{\lambda_0^3}{(2\pi a)^4} = 4 \left(\frac{2\pi^2 m e^4}{h^3 c} \right)^2 = 4R^2,$$

где $R = 1,097 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ — постоянная Ридберга [ср. т. I, (II.2.2) и (II.5.9)]. Следовательно, мы имеем:

$$C = \frac{128}{3e^4} La \lambda_0 R^2.$$

Отсюда для $\lambda_0 = 24 \cdot 10^{-11} \text{ см}$ (т. I, гл. I, § 7) и $L = 6,06 \cdot 10^{28}$ получим:

$$C = 1,00 \cdot 10^{29} \text{ см}^{-1}.$$

Поэтому (8) переписывается в виде:

$$L_{\mu_{\text{вт}}} = 1,00 Z^4 \mu^3 10^{29} \text{ см}^3. \quad (8а)$$

Здесь λ измеряется в см . Если же мы условимся измерять λ в А , то будем иметь:

$$L_{\mu_{\text{вт}}} = 1,00 \cdot 10^{-2} Z^4 \lambda^3. \quad (8б)$$

В указанной формуле¹⁾ т. I стояло 1,36 вместо 1,00, что ввиду приближённого характера вычисления (собственные функции водорода!) следует считать удовлетворительным совпадением.

Однако следует подчеркнуть, что приближение $M = 1$ не является последовательным, так как в предшествующем вычислении [см., например, (6а)] мы не пренебрегали единицей по сравнению с $|n|^3$. Потому более последовательно было бы в (7г) сохранить член с $1/n$ и пренебречь лишь следующим, не выписанным там членом. Если мы это сделаем, то из (6а) сразу получим [надо в левой части (6а) в числителе и знаменателе добавить $|n|^3$, заменить $k|n|$ через Z/a и извлечь кубический корень]:

$$\left(\frac{1 + |n|^3}{|n|^3} \right)^{1/3} = 1 + \frac{1}{3} \frac{1}{|n|^3} = \left(\frac{8\pi^2 a^3}{\lambda_0^3 Z^3} \right)^{1/3}.$$

¹⁾ Выражение « λ измеряется в см », употреблённое там, следует заменить на « λ измеряется в А ».

Поэтому на основании (7г) будем иметь:

$$M = \left(\frac{8\pi^2 a^2}{\lambda_c^2 Z^2} \right)^{1/2}.$$

С учётом этого из (7) получается теоретическое значение более точное, чем даваемое (8):

$$L\mu_{\text{ат}} = C' Z^{2n/2} \lambda^{1/2}, \quad C' = \frac{32 \cdot 2^{1/2}}{3e^4} L\alpha \frac{\lambda_c^{3/2}}{(2\pi a)^{3/2}}. \quad (9)$$

Ту же самую формулу вывел Бете¹⁾.

Из сопоставления многочисленных данных как своих собственных измерений коэффициента поглощения, так и измерений других исследователей (не только k -поглощения, но и L -, M -поглощения) Джонсон²⁾ заключил, что с большой точностью выполняется следующий «закон подобия». Для всех элементов и всех длин волн «коэффициент поглощения на электрон» есть функция только произведения $Z\lambda$, т. е.

$$\mu_{\text{эл}} = \frac{\mu_{\text{ам}}}{Z} = f(Z\lambda). \quad (10)$$

Этому закону удовлетворяет формула (8) с $Lf(Z\lambda) = C(Z\lambda)^2$, но не удовлетворяет теоретически более точная формула (9). Указывает ли это противоречие на неудовлетворительность формулы (9) или же закон Джонсона сам является лишь приближённым законом, этот вопрос остаётся открытым.

В предыдущем изложении мы сравнили равенство (IV.6.1) т. 1 с результатами волновомеханической теории и нашли удовлетворительное согласие. Но о самом равенстве (IV.6.2), которое должно быть справедливо для $\lambda > \lambda_K$ (λ_K — длина волны границы K -поглощения), мы, конечно, ничего не могли сказать, так как в области $\lambda > \lambda_K$ поглощение происходит не за счёт K -электронов, а за счёт L , M , ...-электронов.

Прежде чем переходить к этим L , M , ...-электронам, дадим выражение коэффициента поглощения, справедливость которого не ограничивается K -электронами; при этом падающее излучение будем предполагать достаточно мягким.

Исходя из равенства (1), в котором надо опустить множитель 2 (так как нас теперь интересует поглощение за счёт одного какого-либо электрона, а не за счёт обоих электронов K -оболочки), мы запишем:

$$\frac{8\pi}{3} D = \int J r^2 d\omega. \quad (11)$$

Величина J на основании § 4 равенств (23), (22а) и (22) даётся выражением

$$J = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \frac{\hbar^2 E^2}{16\pi^2 r^2} |X|^2. \quad (12)$$

На основании (4.12) мы имеем:

$$|X|^2 = \frac{(2\pi)^4 N^2}{|\Gamma(1-n)|^2} e^{-\pi|n|} \frac{|A(\theta, \varphi, k)|^2}{(kr)^2}. \quad (13)$$

Это на основании (5б) и (5в) эквивалентно с

$$|X|^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \frac{|A(\theta, \varphi, k)|^2}{r^2}. \quad (14)$$

¹⁾ Г. Бете, Квантовая механика простейших систем, Л.—М., 1935, равенство (47.13); см. также Hagey Hall, Rev. Mod. Phys. 8, 358 (1936).

²⁾ E. Jönsson, Diss., Upsala, 1928; Nature 129, 695 (1927); см. также обсуждение результата Джонсона: F. Kirschner, Handb. d. Exper. Phys., 24, 1.

Подстановка в (12) даёт:

$$J = \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{\hbar}{8\pi^2} \frac{E^2}{r^2} |A(\vartheta, \varphi, k)|^2. \quad (15)$$

Поэтому из (11) следует:

$$\frac{D}{E^2} = \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{3}{64\pi^2} \frac{\hbar}{v^3} \int |A(\vartheta, \varphi, k)|^2 d\omega, \quad (16)$$

и, наконец, из (3) получаем:

$$\mu_{\text{из}} = \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{2\pi\hbar^2}{c^2} \int |A(\vartheta, \varphi, k)|^2 d\omega. \quad (17)$$

Входящая сюда величина A в случае мягкого излучения может быть сведена к выражению для матричных элементов координат. Именно, из (4.46) имеем:

$$A = (pA) \quad (18)$$

и, пренебрегая множителем запаздывания, на основании (4.5) получаем:

$$A = \int \psi^*(\alpha, \beta, k) \text{grad } \psi_0 d\tau. \quad (19)$$

Теперь примем во внимание равенство (1.8.16):

$$\int j d\tau = -2\pi i v \int \rho q d\tau \quad (20)$$

и значение величины j в (1.7.15):

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \text{grad } \psi_0 - \psi_0 \text{grad } \psi^*). \quad (21)$$

Из этих равенств известным способом посредством интегрирования по частям получается:

$$\int j d\tau = \frac{\hbar}{im} \int \psi^* \text{grad } \psi_0 d\tau. \quad (22)$$

Из равенств (19)—(22) заключаем, что

$$A = \frac{2\pi v m}{\hbar} M. \quad (23)$$

Выражение для матричного элемента координат, выписанное более подробно, в нашем случае гласит:

$$M = \int \psi^*(\alpha, \beta, k) q \psi_0 dt. \quad (24)$$

Интегрирование производится по координатам x, y, z , от которых зависят функции ψ_0 и ψ^* ; величины α, β, k характеризуют направление и величину импульса фотоэлектрона. Нам нужно будет, в частности, значение компоненты M_p вектора M в направлении единичного вектора p (направление поляризации падающего света), которое получается из (24), если там величину q заменить величиной (qp) . На основании (18) и (23) величина A выражается через значение этой компоненты следующим образом:

$$A = A(\alpha, \beta, k) = \frac{2\pi v m}{\hbar} M_p(\alpha, \beta, k). \quad (25)$$

Отсюда видно, что A и M_p зависят от α, β, k .

Для получения (17) нам необходимо проинтегрировать $|A|^2$, при этом, конечно, безразлично, обозначить ли углы интегрирования через ϑ, φ или через α, β . Таким образом, из (25) найдём:

$$\int |A(\vartheta, \varphi, k)|^2 d\omega_{\vartheta, \varphi} = \int |A(\alpha, \beta, k)|^2 d\omega_{\alpha\beta} = \left(\frac{2\pi\nu m}{\hbar}\right)^2 \int |M_p(\alpha, \beta, k)|^2 d\omega_{\alpha\beta}. \quad (26)$$

Вместо последнего интеграла, который относится лишь к одной компоненте $|M|^2$, рассмотрим полную сумму квадратов:

$$S = \int (|M_x|^2 + |M_y|^2 + |M_z|^2) d\omega_{\alpha\beta}. \quad (27)$$

Предыдущий интеграл от $|M_p|^2$ при беспорядочной ориентации молекул равен просто $S/3$. Подставляя эту величину в (26), а (26) в (17), будем окончательно иметь:

$$\mu_{\text{ат}} = \frac{8\pi^2 e^2 \nu}{3c} S. \quad (28)$$

В главе VII, § 8 мы увидим, что именно полная сумма квадратов S при мягком излучении вычисляется просто. Там формула (28) даст нам удобный путь к рассмотрению существенных для астрофизики вопросов о равновесии излучения в атмосферах звёзд.

§ 6. ФОТОЭФФЕКТ В L-ОБОЛОЧКЕ

В этом параграфе мы используем общий метод § 4, следовательно, полностью учтём запаздывание и для описания излучённой волны применим собственные функции (4.3). Представление возмущённого состояния в равенствах от (4.4) до (4.6) остаётся тем же самым. Различным будет лишь начальное состояние атома. Вместо собственных функций K -оболочки мы должны использовать собственные функции ψ_I L_I -оболочки и собственные функции ψ_{II} $L_{II} + L_{III}$ -оболочки, которые при нерелятивистском расчёте сливаются. На основании таблицы на стр. 80 мы имеем:

$$\psi_I = N_I \left(1 - \frac{Z}{2a} r\right) e^{-\frac{Zr}{2a}}, \quad N_I^2 = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^3, \quad (1)$$

$$\psi_{II} = N_{II} r e^{-\frac{Zr}{2a}}, \quad N_{II}^2 = \frac{1}{32\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^3. \quad (2)$$

Относительно записи ψ_{II} в виде вектора необходимо заметить, что в $L_{II} + L_{III}$ -оболочке мы должны одновременно рассматривать три собственные функции ($r = x, y, z$), вклады которых в фотоэффект должны быть просуммированы [см. равенство (16) ниже]. Одна из этих трёх собственных функций, именно $r = z$, соответствует квантовым числам $l = 1, m = 0$ (стр. 80), две другие собственные функции в комбинации $\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)$ соответствуют квантовым числам $l = 1, m = \pm 1$ (там же).

L_I-оболочка

Взяв ψ_I вместо прежней функции ψ_0 , получим вместо равенства (4.13) следующее равенство:

$$e^{i(kr)} \text{grad}_r \psi_I = -N_I \frac{Z}{2a} \frac{r}{r} \left(2 - \frac{Z}{2a} r\right) e^{-\frac{Zr}{2a} + i(kr)}. \quad (3)$$

Сравнивая последнее равенство с равенством

$$\text{grad}_x e^{i(xr)} = ir e^{i(xr)}, \quad (3a)$$

включаем, что

$$e^{i(xr)} \text{grad}_r \psi_1 = iN_1 \frac{Z}{2a} \text{grad}_x \left[\frac{1}{r} \left(2 - \frac{Z}{2a} r \right) e^{-\frac{Zr}{2a} + i(xr)} \right]. \quad (3b)$$

Поэтому аналогично (4.46), (4.15) и (4.15а) напишем:

$$A = (\rho A), \quad A = i \frac{Z}{a} NN_1 \text{grad}_x B, \quad (4)$$

$$B = \int r dr \left(1 - \frac{Z}{4a} r \right) e^{-\frac{Z}{2a} r} \int d\omega e^{-i(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}, r)} L_n(\rho). \quad (5)$$

Последний интеграл для B может быть сведён к прежнему интегралу (4.15а), который теперь для отличия будем обозначать через $B(\zeta)$. Под ζ при этом понимается величина Z/a в показателе степени в (4.15а). При этих обозначениях мы можем записать:

$$B = \left(1 + \frac{\zeta}{2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \right) B(\zeta), \quad (5a)$$

причём подразумевается, что впоследствии величина ζ должна быть заменена через $Z/2a$. На основании (4.17а) и (4.16е) имеем:

$$B(\zeta) = 4\pi \frac{c^n}{(c+b)^{n+1}}, \quad \left. \begin{array}{l} c = (\zeta - ik)^2 + x^2, \\ b = 2[ik(\zeta - ik) - (\mathbf{x}k)]. \end{array} \right\} \quad (5b)$$

Прежде чем применять к этому выражению операции, предусмотренные в (5а), более удобно при помощи (4) перейти к величинам A и A . Тогда в A появится скалярное произведение $(\rho, \text{grad}_x B(\zeta))$, которое на основании (4.19) имеет следующее значение:

$$8\pi(n+1)(k\rho) \frac{c^n}{(c+b)^{n+2}}. \quad (5b)$$

Если это значение подставить в A , то получится:

$$A = 8\pi i \frac{Z}{a} (n+1)(k\rho) NN_1 Y, \quad (6)$$

$$Y = \left(1 + \frac{\zeta}{2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \right) \frac{c^n}{(c+b)^{n+2}} = \frac{c^n}{(c+b)^{n+2}} \left[1 - \frac{k^2 n^2 (n-2)}{4c} + \frac{k^2 n^2 (n+2)}{4(c+b)} \right]. \quad (6a)$$

В последнем выражении мы величину ζ заменили через

$$\zeta = \frac{Z}{2a} = \frac{ikn}{2}. \quad (6b)$$

Для дальнейшего применения образуем величину

$$|Y|^2 = e^{2|n|z} \left[\frac{C_1}{(c+b)^4} + \frac{C_2}{(c+b)^5} + \frac{C_3}{(c+b)^6} \right]. \quad (6b)$$

Здесь учтено, что $c+b$ вещественно и положено $c = |c| e^{i\alpha}$ [ср. с формулами (4.19а), (19б), причём, однако, в обеих формулах величину Z/a надо заме-

нить через $Z/2a$. Значения величин C_1, C_2, C_3 следующие:

$$C_1 = 1 + \frac{k^2 n^2}{2|c|} (2 \cos \tau + |n| \sin \tau) - \frac{k^4 n^4}{16|c|^2} (n^2 - 4),$$

$$C_2 = k^2 n^2 + \frac{k^4 n^4}{8|c|} [(n^2 + 4) \cos \tau + 4|n| \sin \tau],$$

$$C_3 = -\frac{k^4 n^4}{16} (n^2 - 4).$$

На основании (4.196) с учётом (6б) входящие сюда величины $\cos \tau$ и $\sin \tau$ имеют следующие значения:

$$\cos \tau = -\frac{1}{4} \frac{n^2 k^2 + x^2 - k^2}{|c|}, \quad \sin \tau = -\frac{ik^2 n}{|c|}.$$

Поэтому после некоторого вычисления получается:

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= \frac{k^4}{|c|^2} \left\{ \left(1 - \frac{n^2}{4}\right)^2 (1 - n^2) - 2 \frac{x^2}{k^2} \left(1 - \frac{n^2}{4}\right) + \frac{x^4}{k^4} \right\}, \\ C_2 &= \frac{k^4 n^2}{|c|^2} \left\{ \left(1 - \frac{n^2}{4}\right)^2 \left(1 - \frac{n^2}{2}\right) - 2 \frac{x^2}{k^2} \left(1 - \frac{n^2}{16}\right) + \frac{x^4}{k^4} \right\}, \\ C_3 &= \frac{k^4 n^4}{16} (n^2 - 4), \quad |c|^2 = k^4 \left\{ \left(\frac{n^2}{4} - 1\right)^2 - 2 \frac{x^2}{k^2} \left(\frac{n^2}{4} + 1\right) + \frac{x^4}{k^4} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (6\gamma)$$

Три величины C не зависят от угловых переменных собственной функции ψ ; так же как и в (4.20а), для знаменателей в (6в) найдём при помощи метода стационарной фазы следующие значения:

$$c + b = \frac{8\pi^2}{\lambda \lambda_0} \Theta; \quad \Theta = 1 - \beta \cos \vartheta + \gamma. \quad (6\delta)$$

После того как вычислено значение A , можно при помощи соотношения (4.12) перейти к величине X . Так же как и в (4.21б), для величины $|X|^2$ из (6) и (6в) получается:

$$|X|^2 = \frac{|C|^2}{r^2} \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \left(\frac{A_1}{\Theta^4} + \frac{A_2}{\Theta^5} + \frac{A_3}{\Theta^6} \right), \quad (7)$$

$$C = 32i\pi^2 \frac{Z}{a} \frac{n+1}{\Gamma(1-n)} N^2 N_1 e^{(\tau - \frac{\pi}{2})|n|}, \quad (7a)$$

$$A_1 = \left(\frac{\lambda \lambda_0}{8\pi^2}\right)^4 C_1, \quad A_2 = \left(\frac{\lambda \lambda_0}{8\pi^2}\right)^5 C_2, \quad A_3 = \left(\frac{\lambda \lambda_0}{8\pi^2}\right)^6 C_3. \quad (7б)$$

Фототок J пропорционален $|X|^2$. Он аналогично (4.23) равен:

$$J = \frac{D}{r^2} \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \left(\frac{A_1}{\Theta^4} + \frac{A_2}{\Theta^5} + \frac{A_3}{\Theta^6} \right), \quad (8)$$

причём коэффициент D связан с величиной C в (7а) соотношением (4.24).

Таким образом, так же как и в случае K -оболочки, мы имеем смещенные распределения фотоэлектронов вперёд, по направлению падающего света, причём это смещение ещё более значительно благодаря добавлению членов с пятой и шестой степенями Θ . Характеристический множитель $\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi$, который [см. (4.20б)] появляется вследствие отклонения фотоэмиссии относительно направления поляризации и характеризует (см. стр. 386) вероятность фотоэмиссии, здесь тот же, что и в случае K -оболочки; изотропная

часть (см. стр. 374) в случае L_I -оболочки отсутствует. Последнее, очевидно, является следствием подобия спектрального типа: K -оболочка = $1s$ -терм, L_I -оболочка = $2s$ -терм. По-другому обстоит дело в случае соответствующей $2p$ -терму

$$L_{II} + L_{III}\text{-оболочки.}$$

Ввиду векторного характера ψ_{II} в (2) величина $\text{grad } \psi_{II}$ является величиной тензорного характера. Поэтому величину r в ψ_{II} заменим через x , и три компоненты ψ_{II} обозначим через ψ_ν ; точно так же вместо grad напишем $\partial/\partial x_\mu$. Тогда на основании (2) будем иметь:

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \psi_\nu = N_{II} \left(\delta_{\mu\nu} e^{-\frac{Z}{2a} r} + x_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} e^{-\frac{Z}{2a} r} \right) = N_{II} \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{Z}{2a} \frac{x_\mu x_\nu}{r} \right) e^{-\frac{Z}{2a} r}.$$

Сравнивая последнее выражение с (3а), получим:

$$e^{i(xr)} \frac{\partial \psi_\nu}{\partial x_\mu} = N_{II} \left(\delta_{\mu\nu} + \frac{Z}{2a} \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \frac{1}{r} \right) e^{-\frac{Z}{2a} r + i(xr)}.$$

Далее учтём, что величину A в (4) мы должны заменить через A_ν (векторный характер величин), а величину A — через $A_{\mu\nu}$ (тензорный характер величин). Тогда вместо равенств (4) найдём:

$$A_\nu = \sum p_\mu A_{\mu\nu}, \quad (9)$$

$$A_{\mu\nu} = NN_{II} \left(\delta_{\mu\nu} B' + \frac{Z}{2a} \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\nu} B \right). \quad (10)$$

Величина B здесь есть тот же интеграл, что и в (4.9а), с той единственной разницей, что величина Z/a должна быть опять заменена через $Z/2a$. Величина B' отличается от B наличием множителя r в числителе подинтегрального выражения. Этот множитель может быть учтён при помощи дифференцирования по $\zeta = Z/2a$ и изменения знака. Отсюда вместо (10) с учётом значения (4.17а) для B получается:

$$A_{\mu\nu} = 4\pi NN_{II} \left(-\delta_{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \zeta \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \right) \frac{c^n}{(c+b)^{n+1}}. \quad (11)$$

Здесь под b и c понимаются выражения (5б) с $\zeta = Z/2a$.

Дифференцирование по ζ даёт:

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} \frac{c^n}{(c+b)^{n+1}} = \frac{-2cn-1}{(c+b)^{n+1}} \left[n(\zeta - lk) - \frac{(n+1)c\zeta}{c+b} \right]. \quad (11a)$$

Дифференцирование по x_μ , x_ν несколько сложнее; результат упростится после того, как мы выполним указанное в (9) умножение на p_μ , ибо вследствие того, что $(p_\mu) = \sum p_\mu x_\mu = 0$, многие члены обратятся в нуль. Тогда получим:

$$\begin{aligned} \zeta \left(\sum p_\mu \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \right) \frac{c^n}{(c+b)^{n+1}} &= 2 \sum p_\mu \delta_{\mu\nu} \frac{c^{n-1}}{(c+b)^{n+1}} \left[\frac{n\zeta - (n+1)\zeta c}{c+b} \right] + \\ &+ 4 \sum p_\mu k_\mu \frac{c^{n-1}}{(c+b)^{n+2}} \left[n(n+1)\zeta - (n+1)(n+2)(x_\nu - k_\nu) \frac{\zeta c}{c+b} \right]. \quad (11б) \end{aligned}$$

Первый член правой части сократится с умноженным на $p_\mu \delta_\mu$, выражением (11a), и из (9), (11), (11a), (11б) получится:

$$A_\nu = 8\pi i k n N N_{II} \frac{c^{n-1}}{(c+b)^{n+1}} [p_\nu + (p k) \{ \}],$$

$$\{ \} = \frac{n(n+1)}{c+b} x_\nu - \frac{(n+1)(n+2)}{(c+b)^2} c(x_\nu - k_\nu). \quad (12)$$

При написании последнего выражения было учтено, что

$$\zeta = \frac{ikn}{2} [\text{см. (6б)}], \quad \sum p_\mu k_\mu = (p k), \quad \sum p_\mu \delta_\mu = p_\nu. \quad (12a)$$

Три компоненты ψ , по ν могут быть сопоставлены трём выделенным при рассмотрении задачи направлениям:

$\nu = 1$, направление падения, $p_\nu = 0$, $x_\nu = x$;

$\nu = 2$, направление поляризации, $p_\nu = 1$, $x_\nu = 0$;

$\nu = 3$, перпендикулярное к предыдущим направление, $p_\nu = 0$, $x_\nu = 0$.

Поэтому дополнительный член p_ν в (12) появится только в A_2 , члены с x_ν появятся в A_1 .

Теперь мы должны, так же как и в случае L_1 -оболочки, вставить выражение (12) для A_ν в (4.12), в результате чего для каждого $\nu = 1, 2, 3$ получим по одной величине X_ν . Нам понадобятся лишь значения величин $|X_\nu|^2$:

$$|X_\nu|^2 = \frac{|C|^2}{r^2} |Y_\nu|^2, \quad (13)$$

где введены обозначения:

$$\left. \begin{aligned} Y_1 &= \frac{(p k)(1+n)}{(c+b)^2} \left\{ n x + \frac{x-k_1}{c+b} g \right\}, \\ Y_2 &= \frac{1}{c+b} - \frac{(p k)(1+n)}{(c+b)^2} k_2 g, \\ Y_3 &= -\frac{(p k)(1+n)}{(c+b)^2} k_2 g, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

$$g = 2k^2 \left(1 - \frac{n^2}{4} - \frac{x^2}{k^2} \right) - nk^2 \left(1 - \frac{n^2}{4} + \frac{x^2}{k^2} \right), \quad (14a)$$

$$|C| = 32\pi^3 |n| N^2 N_{II} \frac{e^{-\frac{\pi}{2}n}}{\Gamma(1-n)}. \quad (14б)$$

Из (14) после небольшого подсчёта следует:

$$\sum |Y_\nu|^2 = \frac{1}{(c+b)^2} + (p k)^2 \left[\frac{C_1}{(c+b)^4} + \frac{C_2}{(c+b)^6} + \frac{C_3}{(c+b)^8} \right]. \quad (15)$$

Здесь C являются вещественными постоянными, имеющими следующие значения:

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= -4k^2 \left[\left(1 - \frac{n^2}{4} \right) \left(1 - \frac{3}{4}n^2 + \frac{1}{4}n^4 \right) - (1+n^2) \frac{x^2}{k^2} \right], \\ C_2 &= 4(1-n^2)k^4 \left[\left(1 - \frac{n^2}{4} \right)^2 \left(1 - \frac{n^2}{2} \right) - 2 \left(1 - \frac{n^4}{16} \right) \frac{x^2}{k^2} + \frac{x^4}{k^4} \right], \\ C_3 &= n^2(1-n^2) \left(1 - \frac{n^2}{4} \right) k^6 \left[\left(1 - \frac{n^2}{4} \right)^2 - 2 \left(1 + \frac{n^2}{4} \right) \frac{x^2}{k^2} + \frac{x^4}{k^4} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (15a)$$

Вклад ν -й собственной функции в фототок пропорционален величине $|X_\nu|^2$ [множитель пропорциональности $\frac{\hbar k}{m} \left| \frac{e \hbar E}{4\pi\nu} \right|^2$, как в (4.24)]. Полный фототок J равен сумме этих трёх членов; поэтому с учётом (13) и (15) найдём:

$$J = \frac{D}{r^2} \left[\frac{1}{\Theta^2} + \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \left(\frac{A_1}{\Theta^4} + \frac{A_2}{\Theta^5} + \frac{A_3}{\Theta^6} \right) \right]. \quad (16)$$

Величина $\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi$ здесь учитывает множитель $(pk)^2$ в (15) [ср. (4.206)]; величина Θ имеет то же значение, что и в (6д).

Далее, на основании (15), (13) и (6д) имеем:

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= \left(\frac{\lambda \lambda_c}{8\pi^2} \right)^2 k^2 C_1, & A_2 &= \left(\frac{\lambda \lambda_c}{8\pi^2} \right)^2 k^2 C_2, \\ A_3 &= \left(\frac{\lambda \lambda_c}{8\pi^2} \right)^4 k^2 C_3, & D &= \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{e \hbar E}{4\pi\nu} \right)^2 \left(\frac{\lambda \lambda_c}{8\pi^2} \right)^2 |C|^2, \end{aligned} \right\} \quad (16a)$$

где C_1, C_2, C_3 даны в (15а), $|C|^2$ — в (14б).

Равенство (16) гласит: четыре составные части, из которых складывается J , дают смещение распределения электронов вперёд, отвечающее значениям знаменателей $\Theta^2, \Theta^4, \Theta^5, \Theta^6$. Кроме того, три члена зависят от направления (множитель $\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi$, который появляется за счёт отклонения фотоэмиссии от направления поляризации); один член не зависит от направления. Если бы вместо собственных функций непрерывного спектра (4.2) были взяты плоские волны $e^{i(kr)}$, то эта изотропная часть исчезла бы¹⁾.

Если равенства (8) и (16) разложить по возрастающим степеням β и пренебречь величиной γ , то получатся формулы Шура²⁾, впервые проведшего строгий расчёт фотоэмиссии из L -оболочки. Эти результаты находятся также в полном согласии с работами Заутера и Фишера (см. стр. 374).

§ 7. ФОТОЭФФЕКТ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В качестве примера применения теории возмущений Дирака в нестационарном случае (гл. V, § 4) рассмотрим ещё раз фотоэффект в K -оболочке, предполагая, что атом (водородный атом) до момента $t=0$ не подвергался действию возмущения, а при $t > 0$ стал находиться под действием падающей световой волны. При такой постановке задачи мы будем в состоянии вычислить не только величину фотоэмиссии, но и проследить развитие процесса во времени. При этом, следуя Бете³⁾, будем вести расчёт в полярных координатах, используя сферические волны. Расчёт в параболических координатах и с плоскими волнами проводится совершенно аналогично.

Состояние атома может быть характеризовано полной системой зависящих от времени собственных функций дискретного и непрерывного спектра

¹⁾ См. J. Frenkel, Phys. Rev. 38, 309 (1931), а также Гайтлер, Квантовая теория излучения, ГТИ, 1940; Г. Бете, Квантовая механика простейших систем, ОНТИ, 1935.

²⁾ G. Schur, Ann. d. Phys. 4, 433 (1930).

³⁾ H. Bethe, Ann. d. Phys. 4, 433 (1930).

на основании (II. 7.33a) будет равно

$$\gamma = |n| \ln 2kr + \alpha - \frac{\pi}{2}, \quad e^{i\alpha} = \frac{\Gamma(n+2)}{|\Gamma(n+2)|}, \quad (5)$$

где

$$n = \frac{Z}{ika}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\omega}. \quad (6)$$

Теперь можно вычислить интеграл (3). Этот интеграл может быть разложен на две части путём представления $\sin(kr + \gamma)$ в равенстве (4) в виде суммы двух показательных функций. При интегрировании существенным будет лишь участок в окрестности точки обращения в нуль знаменателя в (3)

$$\omega = \omega_0, \quad \omega_0 = W_0 + k\nu. \quad (7)$$

Эта точка соответствует закону Эйнштейна, ω_0 есть кинетическая энергия испущенного электрона. Соответствующее значение k будет равно

$$k_0 = \frac{m\nu_0}{\hbar}. \quad (8)$$

В «медленно меняющихся» частях A , N , C , γ в (3) и (4) величина k может быть заменена через k_0 ; она должна быть сохранена лишь в $\exp(\pm ikr)$, получившихся из $\sin(kr + \gamma)$; разложение k в ряд будет иметь вид:

$$k = k_0 + \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_0 (\omega - \omega_0), \quad \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_0 = \frac{1}{\hbar\nu_0} \quad [\text{ср. (6)}]. \quad (9)$$

Таким образом, из (3), вынося не зависящий от ω множитель:

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(W_0 + k\nu)t\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t\right],$$

получим:

$$u = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{b}{2ik_0} A_0 N_0 C_0 \frac{\sin \vartheta \cos \varphi}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t} \{e^{i(kr+\gamma_0)} - e^{-i(kr+\gamma_0)}\},$$

$$I = \int_0^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{r}{\nu_0}(\omega-\omega_0)} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{r}{\nu_0}-t\right)(\omega-\omega_0)}}{\omega - \omega_0} d\omega, \quad (10)$$

$$II = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{r}{\nu_0}(\omega-\omega_0)} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{r}{\nu_0}-t\right)(\omega-\omega_0)}}{\omega - \omega_0} d\omega.$$

Оба интеграла I и II для $\omega = \omega_0$ будут регулярными. Следовательно, интегрирование вдоль действительной оси имеет смысл. Однако нам ничто не мешает перевести этот путь в комплексную плоскость. При этом можно снова обратиться к рис. 27, где вместо k и k_0 надо подразумевать ω и ω_0 и выбрать нарисованный сплошной линией путь, который огибает точку $\omega = \omega_0$ снизу. Однако этот выбор пути в данном случае имеет совершенно иной смысл, чем это было ранее. Ранее путь интегрирования вдоль действительной оси был невозможен из соображений сходимости интеграла; изменение пути интегрирования имело физический смысл и делалось таким образом, чтобы иметь возможность удовлетворить условию излучения на бесконечности. Теперь же это изменение пути интегрирования делается лишь ради математического упрощения. Мы могли бы, например, выбрать и пунктирный путь рис. 27, не изменяя ничего в результатах расчётов.

Математическое упрощение состоит в том, что можно после изменения пути интегрирования обе части интегралов I и II (которые будут обозначаться через I_1, I_2 и Π_1, Π_2) вычислить отдельно, проводя путь интегрирования в бесконечность в нижней или верхней полуплоскости ω в зависимости от того, будет ли мнимая часть множителя при $\omega = \omega_0$ в показателе степени отрицательной или положительной. Появляющиеся при этом интегралы вдоль мнимой полуоси от 0 до $\mp i\infty$ могут быть отброшены, так как они исчезают как экспоненциальные величины с отрицательным показателем степени.

При выборе пути интегрирования со стороны отрицательной мнимой полуплоскости части Π_1 и Π_2 дают нуль, так как они обе имеют при $\omega = \omega_0$ множитель в показателе степени с отрицательной мнимой частью. Часть I_1 имеет мнимый в показателе степени множитель с положительной мнимой частью, и, следовательно, путь интегрирования должен быть переведён в верхнюю полуплоскость, что означает обход в положительном направлении вокруг полюса $\omega = \omega_0$ и поэтому даст вычит $+2\pi i$. То же самое справедливо для I_2 , когда $t < r/v_0$. В этом случае, следовательно, будем иметь $I = 2\pi i - 2\pi i = 0$. Если же $t > r/v_0$, то $I_2 = 0$ и $I = 2\pi i$.

Таким образом, можно написать:

- а) для $r < v_0 t$ $I = 2\pi i, \quad \Pi = 0;$
 б) для $r > v_0 t$ $I = 0, \quad \Pi = 0.$

Расстояние $r_0 = v_0 t$ есть то расстояние, на которое удалился фотоэлектрон, испущенный в момент $t = 0$, летящий со скоростью v_0 , определяемой законом Эйнштейна. Таким образом, $r = r_0$ есть фронт фототока. В случае а) точка наблюдения r находится внутри этого фронта, в случае б) — вне этого фронта. Лишь в случае а) волновая функция u и плотность электронов $|u|^2$ отличны от нуля. В случае б) изменение, вызванное включением возмущения в $t = 0$, ещё не достигло точки наблюдения. В случае а), отбрасывая постоянные множители, из (10) получим:

$$u \sim \frac{\sin \theta \cos \varphi}{r} e^{i(kr + \gamma_0 - \omega t)}, \quad \omega = \frac{v_0}{\hbar}. \quad (11)$$

Таким образом, мы имеем *расходящуюся* сферическую волну; связанная первоначально с этой волной сходящаяся сферическая волна представляется в (10) членом с множителем Π ; действительно, показательная функция в этом члене в противоположность (11) будет иметь вид:

$$e^{-i(kr + \gamma_0 + \omega t)}. \quad (11a)$$

Однако этот член ввиду того, что $\Pi = 0$, исчезает для рассматриваемых (больших) расстояний r . Таким образом, физически ненужная сходящаяся волна, которая в стационарном случае исключалась из рассмотрения при специальном предположении, в нестационарной теории возмущений Дирака исключается автоматически.

Общее число электронов, испущенных до момента времени t , получится путём интегрирования $|u|^2$ по шару радиуса r . Если мы воспользуемся приближённым выражением (11), то непосредственно заметим, что результат будет пропорционален величине r_0 , т. е. также пропорционален t , как это и должно быть.

Проведённое вычисление не совсем строго, если речь идёт об окрестности значений $r = r_0$. В этом случае множитель при $\omega = \omega_0$ в I_2 и Π_2 не будет более большой величиной и пренебрежение интегралами вдоль мнимых полуосей более не оправдано. Отсюда можно заключить, что фронт фототока сопровождается «предвестниками» и «хвостами», которые делают непрерывным

переход от случая а) к случаю б). Далее можно было бы уточнить вычисление, сохранив член с γ . Это дало бы некоторое смещение фронта фотоэлектронов наружу, что, согласно Бете, позволяет сделать вывод о несколько большей, чем v_0 , скорости фотоэлектронов вблизи атома.

§ 8. ФОТОЭФФЕКТ ДЛЯ ОЧЕНЬ ЖЁСТКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ; РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ПОПРАВКА

В качестве подготовки нам необходимо теорию возмущений Шредингера из гл. V переписать в виде, пригодном для уравнения Дирака. Возмущение предполагается заданным, как и там в § 3, в виде плоской световой волны, распространяющейся в направлении оси x и поляризованной в направлении оси y , даваемой соотношениями (V. 3.1).

А. Некоторые замечания о релятивистской теории возмущений. Уравнение Дирака, согласно (IV. 2.4), имеет вид:

$$\left[(\gamma \text{grad}) + \frac{\gamma_4}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + V \right) + \frac{E_0}{\hbar c} \right] u = \frac{ie}{\hbar c} \gamma_2 A_y u_0, \quad (1)$$

где

$$\Phi_1 = \Phi_3 = 0, \quad \Phi_2 = A_y, \quad \Phi_4 = iV/e.$$

В этом уравнении в членах возмущения, перенесённых вправо, функция u уже заменена через волновую функцию u_0 невозмущённого атома:

$$u_0 = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_0 t}, \quad (2)$$

где через ϵ_0 (в отличие от энергии покоя E_0) обозначена энергия исходного состояния. Учитывая вид зависимости от времени и полагая так же, как в (V. 3.5):

$$\left. \begin{aligned} u &= u_0 + b w, \quad b = \frac{ie}{\hbar c} \frac{a}{2}, \\ w &= w_+ e^{-\frac{i}{\hbar} (\epsilon_0 + \hbar\nu) t} + w_- e^{-\frac{i}{\hbar} (\epsilon_0 - \hbar\nu) t}, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

мы для w_{\pm} из (1) получим следующее уравнение:

$$\left[(\gamma \text{grad}) - \frac{\gamma_4}{\hbar c} (\epsilon_0 \pm \hbar\nu - V) + \frac{E_0}{\hbar c} \right] w_{\pm} = \gamma_2 \psi_0 e^{\pm 2\pi i a / \lambda}. \quad (4)$$

С этим уравнением будет легче оперировать, если его умножить слева на γ_4 , тем самым освобождая член с энергией от величины γ . Следовательно, мы можем написать:

$$\left[\gamma_4 (\gamma \text{grad}) - \frac{1}{\hbar c} (\epsilon_0 \pm \hbar\nu - V) + \gamma_4 \frac{E_0}{\hbar c} \right] w_{\pm} = \gamma_4 \gamma_2 \psi_0 e^{\pm 2\pi i a / \lambda}. \quad (5)$$

Правую часть этого уравнения и w_{\pm} разложим по собственным функциям невозмущённого состояния, имея в виду лишь ту часть разложения, которая связана с непрерывным спектром:

$$\gamma_4 \gamma_2 \psi_0 e^{\pm 2\pi i a / \lambda} = \dots \int A_E \psi_E dE, \quad (6)$$

$$w_{\pm} = \dots \int B_E \psi_E dE. \quad (7)$$

Подстановка этих выражений в (5) (см. стр. 310) даёт:

$$B_E = \hbar c \frac{A_E}{E - \epsilon_0 \mp \hbar\nu}. \quad (7a)$$

Величины A и B , являясь коэффициентами разложения, суть обыкновенные комплексные числа. Следовательно, зависимость левой части (6) от величин γ в правой части определится зависимостью функций ψ_E от γ .

Интегрирование по E в (7) распространено от E_0 до ∞^1). Для не слишком малых $h\nu$ имеют место неравенства

$$\varepsilon_0 + h\nu > E_0, \quad \varepsilon_0 - h\nu < E_0,$$

причём последнее имеет место потому, что уже одно ε_0 как энергия в дискретном спектре меньше чем E_0 . Следовательно, знаменатель в B исчезает при выборе верхнего знака, что соответствует выбору функций ω_+ . На основании изложенного на стр. 377 (рис. 27) нам надо учесть лишь ω_+ . Отбрасывая, следовательно, функцию ω_- , а также u_0 , которая исчезает на бесконечности вместо (3) с учётом (7) и (7а) мы имеем:

$$u = b\hbar c X e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_0 + h\nu)t}, \quad (8)$$

$$X = \int \frac{dE}{E - \varepsilon_0 - h\nu} A_E \psi_E. \quad (8a)$$

Пусть точка, для которой необходимо вычислить ψ_E , лежит в бесконечности. Тогда путь интегрирования по E , так же как и путь интегрирования по k на рис. 27, с точностью до исчезающих членов может быть стянут к одной точке, в данном случае к точке $E = \varepsilon$, где ε — энергия, получаемая по закону Эйнштейна (включая энергию покоя E_0 электрона), именно:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + h\nu. \quad (9)$$

Значение для X , которое было бы получено таким путём,

$$X = 2\pi i A_E \psi_{\varepsilon_0}, \quad (10)$$

не является полным. Действительно, интегралы в (6) и (7) берутся по полной системе собственных функций ψ_E непрерывного спектра. Эта система, кроме учтённой в (9) зависимости от E , обладает ещё степенями свободы двоякого рода:

а) ∞^3 -кратное множество входящих в них угловых переменных;

б) двукратное множество ориентаций спинов.

а) Если бы мы вычисляли в полярных координатах, то должны были бы добавить суммирование по квантовым числам l, m . Однако предпочтительнее аналогично § 4 провести интегрирование по углам α, β выхода вылетающих электронов. Таким путём вместо (10) получим:

$$X = 2\pi i \int d\omega_{\alpha\beta} A_E \psi_{\varepsilon_0}. \quad (10a)$$

б) Собственные функции ψ_E , по которым в (6) и (7) проведено разложение, кроме зависимости от углов α, β , содержат также зависимость от спина. В зависимости от того, имеем ли мы спин направленным параллельно или антипараллельно некоторой оси, мы будем иметь две различные функции ψ , которые будем различать значениями $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$. Благодаря этому ψ_{ε_0} в (10a) и также X становятся зависимыми от «спиновой переменной» λ . Для

¹⁾ Собственно говоря, также и по континууму отрицательных уровней энергии от $-\infty$ до $-E_p$. Однако, ввиду того что эти уровни предполагаются занятыми, переход на них запрещён принципом Паули. Поэтому вклад отрицательных уровней энергии в фотоэффект можно не учитывать.

полноты проведённых выше разложений необходимо, следовательно, в (10а) добавить ещё суммирование по λ , т. е. образовать величину

$$\sum_{\lambda=1,2} X_{\lambda}. \quad (106)$$

Для того чтобы покончить с замечаниями, касающимися теории возмущений, необходимо ещё дать общую форму коэффициентов A_E . Это можно сделать на основании условия ортогональности в релятивистском случае (IV. 3.21), которое для наших целей можно коротко¹⁾ записать в виде:

$$\int \bar{\psi}_{E'} \gamma_4 \psi_E d\tau = \delta_{EE'}. \quad (11)$$

Применяя (11) к (6) (умножение слева на $\bar{\psi}_E \gamma_4$ и интегрирование по координатам с $E = E'$, получим:

$$A_E = \int \bar{\psi}_E \gamma_4 \psi_0 e^{2\pi i \omega t / \lambda} d\tau. \quad (12)$$

Для дальнейшего будет более удобно это равенство переписать в более общей форме. Именно, вместо волнового числа $\kappa = 2\pi/\lambda$ волны, распространяющейся вдоль оси x , введём волновой вектор κ произвольного направления и соответственно этому вместо оси x как направления поляризации введём единичный вектор p в направлении поляризации $p \perp \kappa$.

Тогда равенство (12) перейдёт в равенство

$$A_E = \int \bar{\psi}_E(\gamma p) \psi_0 e^{i(\kappa r)} d\tau. \quad (12a)$$

Так как на основании сказанного выше величины A_E не должны в себе содержать γ , то зависимость от γ в (12a) необходимо исключить посредством делителей нуля, содержащихся в собственных функциях, и под A понимать лишь численные коэффициенты делителей нуля.

Б. Выбор собственных функций и выполнение интегрирования в (10а). Проще всего опираться на результаты гл. V, § 8; где из решения уравнения Шредингера было получено соответствующее решение в первом приближении для уравнения Дирака. При этом «первое приближение» означает то же самое, что и «первый порядок по αZ ».

В этом смысле для функции ψ_0 , у которой индекс «нуль» означает «начальное состояние», а отнюдь не «нулевое приближение», мы используем представление (V. 8.20) со следующим изменением в написании:

$$\psi_0 = N_0 \left[1 - \frac{\alpha Z}{2} \gamma_4 \left(\gamma \frac{r}{r} \right) \right] e^{-\alpha r} \Gamma_0, \quad q = \frac{\alpha_0 \alpha Z}{\hbar c}. \quad (13)$$

Обозначение q совпадает с обозначением λ из (V. 8.16а). Относительно выбора добавленного в правую часть множителя Γ_0 , который во всяком случае содержит делитель нуля $(1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12})$, будет сказано позднее.

Представление для ψ_E мы получим из (V. 8.24), где необходимо заменить k , l через $-k$, $-l$, что было обосновано на стр. 389. Тогда это представление будет гласить:

$$\psi_E = N e^{i(\kappa r)} \left[1 + \frac{\beta}{2k} \gamma_4 (\gamma \text{ grad}) \right] L_{-n}(-\rho) \Gamma, \quad (14)$$

$$\rho = i[kr + (\kappa r)], \quad n = \frac{\alpha Z}{i\beta}. \quad (14a)$$

¹⁾ Более подробно надо было бы привести соображения из гл. II, § 8 относительно собственных дифференциалов. Далее необходимо справа к $\delta_{EE'}$ добавить нормирующий множитель с γ .

Направление волнового вектора k характеризуется углами α , β , по которым сейчас будет проведено интегрирование.

Для перехода к сопряжённой волновой функции $\bar{\psi}_E$ необходимо (см. стр. 358) поменять порядок множителей γ и одновременно изменить знак γ и i (но не γ_4); следовательно,

$$\bar{\psi}_E = N e^{-i(kr)} \bar{\Gamma} \left[1 - \frac{\beta}{2k} (\gamma \text{ grad}) \gamma_4 \right] L_n(\rho). \quad (15)$$

Наконец, необходимое для (10а) асимптотическое выражение ¹⁾ ψ_E на основании (4.7) имеет вид:

$$\psi_{\infty} = N e^{i(kr)} \frac{\rho^{-n}}{\Pi(-n)} \Gamma. \quad (15a)$$

Поправочный член в (14), связанный с grad, ничего не прибавляет к асимптотическому значению ψ , так как

$$\text{grad } \rho^{-n} = -n \rho^{-n-1} \text{ grad } \rho$$

в пределе при $\rho \rightarrow \infty$ исчезает по сравнению с ρ^{-n} . Так как благодаря этому ψ_{∞} имеет такое же значение, как и в § 4, то и для X , образованного из ψ_{∞} , мы можем сразу взять значение (4.12). При теперешних обозначениях получаем:

$$X = -\frac{(2\pi)^2 N}{\Pi(-n)} e^{-\frac{\pi}{2}|n|} A(\theta, \varphi, k) \frac{e^{i(kr + |n| \ln 2kr)}}{kr} \Gamma. \quad (16)$$

В. Вычисление матричных элементов $A(\theta, \varphi, k)$ из равенства (12а). Так как мы ограничиваемся первым порядком по αZ , то надо написать:

$$A = A_0 + A_1 + A_2.$$

Здесь A_0 есть член нулевого приближения, который, следовательно, получается, если в (13) и (15) опустить поправочные члены. Член A_1 получится при комбинировании поправочного члена в (13) с главным членом в (15), член A_2 — при обратном комбинировании. Мы получаем:

$$A_0 = NN_0 \bar{\Gamma}(\gamma p) J_0 \Gamma_0, \quad (17)$$

$$J_0 = \int e^{-qr + i(z-h, r)} L_n(\rho) d\tau. \quad (17a)$$

и соответственно

$$A_1 = NN_0 \bar{\Gamma}(\gamma p) \gamma_4 (\gamma J_1) \Gamma_0, \quad (18)$$

$$J_1 = -\frac{\alpha Z}{2} \int e^{i(z-h, r)} L_n(\rho) \frac{r}{r} e^{-qr} d\tau, \quad (18a)$$

$$A_2 = NN_0 \bar{\Gamma}(\gamma J_2) \gamma_4 (\gamma p) \Gamma_0, \quad (19)$$

$$J_2 = -\frac{\beta}{2k} \int e^{-qr + i(z-h, r)} \text{grad } L_n(\rho) d\tau. \quad (19a)$$

Собрав (17), (18), (19), найдём, что

$$A = NN_0 \bar{\Gamma} \{ (\gamma p) J_0 + (\gamma p) \gamma_4 (\gamma J_1) + (\gamma J_2) \gamma_4 (\gamma p) \} \Gamma_0 \quad (20)$$

¹⁾ В знаменателе вместо $\Gamma(1-n)$ мы ввели обозначение $\Pi(-n)$ для того, чтобы букву Γ оставить для обозначения множителя в числителе, содержащего величину γ .

или после некоторых преобразований величин γ , положив $\tau = \gamma_{12a}$,

$$\left. \begin{aligned} A &= NN_0 \bar{\Gamma} \{ (\gamma B_0) + \gamma_4 B_1 + \gamma_4 \tau (\gamma B_2) \} \Gamma_0, \\ B_0 &= p J_0, \quad B_1 = - (p, J_1 + J_2), \quad B_2 = - [p, J_1 - J_2]. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Интегралы J_0, J_1, J_2 сводятся к интегралу B в (4.15а), если там величину Z/a заменить через q и в соответствии с этим написать:

$$B = \int e^{-q\tau + i(x-k, \tau)} L_n(p) \frac{d\tau}{\tau}. \quad (22)$$

Легко убедиться, что

$$J_0 = -\frac{\partial B}{\partial q}, \quad J_1 = \frac{i}{2} \alpha Z \text{grad}_x B \quad (22a)$$

и после интегрирования по частям в (19а) также

$$J_2 = i \frac{\beta}{2k} \left\{ q \text{grad}_x - (x-k) \frac{\partial}{\partial q} \right\} B = \frac{i}{2} \alpha Z \frac{\beta_0}{c} \left(\text{grad}_x - \frac{x-k}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) B. \quad (22б)$$

Если эти значения J_0 и J_2 подставить в (21), то матричный элемент A будет определён. Получение численного значения будет выполнено вместе с суммированием во возможных состояниях ориентации спина.

Г. Переход к плотности фототока. Плотность в возмущённом состоянии u , именно $\bar{u} \gamma_4 u$, получится путём замены X на основании (10б) через $\sum_{\lambda, \lambda'} X_\lambda$ и соответственно для сопряжённого значения \bar{X} — через $\sum_{\lambda, \lambda'} \bar{X}_\lambda$. Поэтому будем иметь двойную сумму по λ и λ' , именно [ср. также (3)]:

$$\bar{u} \gamma_4 u = \left(\frac{ea}{2} \right)^2 \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \bar{X}_\lambda \gamma_4 X_\lambda.$$

Вставляя вместо X его значение (16) и вместо \bar{X} — соответствующее значение (перемена порядка множителей γ , замена γ, i на $-\gamma, -i$), получим:

$$\bar{u} \gamma_4 u = \frac{C}{r^2} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \bar{\Gamma}_\lambda \bar{A}_\lambda \gamma_4 A_\lambda \Gamma_\lambda, \quad (23)$$

$$C = \left(\frac{2\pi^2 ea}{k | \Pi(-n) |} \right)^2 e^{-\pi |n| N^2}. \quad (23a)$$

Как было уже замечено ранее, под A и \bar{A} следует понимать обыкновенные комплексные числа. Индексы λ и λ' при A и \bar{A} показывают, что эти числа зависят от выбора множителя Γ в соответствующих собственных функциях (14) и, следовательно, от λ и λ' . Кроме того, величины A и \bar{A} зависят ещё от спина в собственной функции (13), который учитывается множителем Γ_0 , так что по существу A и \bar{A} надо было бы снабдить ещё одним индексом λ_0 . Однако нам это понадобится только в следующем разделе Д.

Ввиду того, что величины A, \bar{A} являются числами и учитывая значение Γ и $\bar{\Gamma}$, видим, что двойная сумма в (23) упрощается, так как все члены с $\lambda \neq \lambda'$ из-за (IV.5.47) пропадают. Это соотношение, первоначально выведенное для множителей Γ плоской волны, переносится на собственные функции (14), множитель Γ которых в (V.8.25) был определён именно из срав-

нения поведения этих функций с плоской волной. Таким образом, вместо (23) найдём:

$$\bar{u}\gamma_4 u = \frac{c}{r^2} \sum_{\lambda} \bar{A}_{\lambda} A_{\lambda} \Gamma_{\text{норм}}. \quad (24)$$

Здесь под $\Gamma_{\text{норм}}$ понимается стоящий справа в (IV. 5.47) делитель нуля:

$$\Gamma_{\text{норм}} = \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}). \quad (24a)$$

Однако для дальнейшего будет удобнее вернуться к выражениям, из которых величины γ не исключены. Это можно сделать, если мы в (24) заменим

$\Gamma_{\text{норм}}$ через $\Gamma_{\text{норм}}^2$
и напомним:

$$\bar{A}_{\lambda} A_{\lambda} \Gamma_{\text{норм}}^2 = A_{\lambda} \bar{A}_{\lambda} \Gamma_{\text{норм}}^2 = A \bar{A}. \quad (25)$$

Поэтому вместо (24) можно также написать:

$$\bar{u}\gamma_4 u = \frac{c}{r^2} \sum_{\lambda} A \bar{A}. \quad (26)$$

Индекс λ , по которому проводится суммирование, содержится в множителях $\bar{\Gamma}_{\lambda}$, Γ_{λ} , на которые на основании (21) умножаются не освобождённые от величин γ выражения A , \bar{A} .

Д. Суммирование по состояниям спина обоих K -электронов. K -оболочка, о фотоэффекте из которой идёт речь, содержит два электрона (кроме атома водорода) с противоположно ориентированными спинами.

Равенство (26) справедливо для каждого из K -электронов. Так как их вклады в фототок не могут быть экспериментально разделены, то надо учесть их суперпозицию. Из (V. 8.21) нам известно, что двум направлениям спина с $m = \pm \frac{1}{2}$ соответствуют следующие значения Γ_0 :

$$\Gamma_0 = \left\{ \begin{matrix} \gamma_{12} \\ 1 \end{matrix} \right\} \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}) = \left\{ \begin{matrix} \gamma_{12} \\ 1 \end{matrix} \right\} \Gamma_{\text{норм}}. \quad (27)$$

Оба эти значения мы будем отличать верхним индексом $\lambda_0 = 1, 2$. Поэтому вместо (26) необходимо в качестве вклада в фототок обоих K -электронов образовать величину

$$\sum_{\lambda_0=1,2} \bar{u}\gamma_4 u = \frac{c}{r^2} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda_0} A^{\lambda_0} \bar{A}^{\lambda_0}. \quad (28)$$

Суммирование по λ_0 может быть здесь выполнено непосредственно. Если вместо (21) положить для сокращения

$$A^{\lambda_0} = \bar{\Gamma}_{\lambda_0} p \Gamma_0^{\lambda_0}, \quad p = NN_0 \{ (\gamma B_0) + \gamma_4 B_1 + \gamma_4 \tau (\gamma B_2) \} \quad (29)$$

и, следовательно,

$$\bar{A}^{\lambda_0} = \bar{\Gamma}_0^{\lambda_0} \bar{p} \Gamma_{\lambda_0}, \quad \bar{p} = NN_0 \{ -(\gamma B_0) + \gamma_4 B_1^* - (\gamma B_2) \tau \gamma_4 \}, \quad (29a)$$

то сразу получается:

$$\sum_{\lambda} A^{\lambda_0} \bar{A}^{\lambda_0} = \bar{\Gamma}_{\lambda} p \sum_{\lambda_0} \Gamma_0^{\lambda_0} \bar{\Gamma}_0^{\lambda_0} \cdot \bar{p} \Gamma_{\lambda}. \quad (30)$$

Но на основании (27), ввиду того, что $\bar{\Gamma}_{\text{норм}} = \Gamma_{\text{норм}}$ и $\Gamma_{\text{норм}}^2 = \Gamma_{\text{норм}}$, найдём:

$$\sum_{\lambda} \Gamma_0^{\lambda} \bar{\Gamma}_0^{\lambda} = \gamma_{12} \Gamma_{\text{норм}} \gamma_{21} + \Gamma_{\text{норм}}. \quad (31)$$

Далее мы имеем:

$$\Gamma_{\text{норм}} \gamma_{21} = \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}) \gamma_{21} = \gamma_{21} \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 - i\gamma_{12}),$$

откуда в качестве значения правой части (31) получаем:

$$\frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 - i\gamma_{12}) + \frac{1}{4} (1 + \gamma_4) (1 + i\gamma_{12}) = \frac{1}{2} (1 + \gamma_4). \quad (31a)$$

Подставляя это значение в (30), а (30) в (28), для вклада обоих электронов в фототок получим следующее выражение, не содержащее величины Γ_0 :

$$\sum_{\lambda} \bar{u} \gamma_4 u = \frac{C}{2r^2} \sum_{\lambda} \bar{\Gamma}_{\lambda} p (1 + \gamma_4) \bar{p} \Gamma_{\lambda}. \quad (32)$$

Е. Суммирование по спинам конечного состояния. Теперь нам осталось ещё произвести суммирование по λ . Запишем:

$$\sum_{\lambda} \bar{u} \gamma_4 u = \frac{C}{2r^2} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda} = \sum_{\lambda} \bar{\Gamma}_{\lambda} p \Gamma_{\lambda}, \quad (33)$$

где на основании (32) и (29) положено:

$$P = p (1 + \gamma_4) \bar{p} = N^2 N_0^2 [(\gamma B_0) + B_1 + \\ + \tau (\gamma B_2)] (1 + \gamma_4) [-(\gamma B_0) + B_1 - (\gamma B_2) \tau].$$

В последнем выражении множители γ_4 , содержащиеся в p и \bar{p} , опущены, так как они могут быть включены в стоящий между ними множитель $1 + \gamma_4$. Далее мы произведём перемножение в P с учётом соотношений между γ , но выпишем лишь те члены, которые умножены на 1, γ_4 или γ :

$$P = N^2 N_0^2 [1 \cdot P_1 + \gamma_4 P_2 + (\gamma P_3) + \dots], \quad (33a)$$

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= -(B_0 B_0^*) + B_1 B_1^* + (B_2 B_2^*), \\ P_2 &= +(B_0 B_0^*) + B_1 B_1^* + (B_2 B_2^*), \\ P_3 &= [B_0 B_2^*] - [B_0^* B_2] + B_0 B_1^* - B_2^* B_1. \end{aligned} \right\} \quad (33b)$$

Остальные члены в (33a) опущены на том основании, что ввиду равенства (IV. 5.50) все остальные произведения γ при выполнении суммирования по состояниям спина дадут нуль. Лишь члены, выписанные в (33a), дадут отличные от нуля значения на основании (IV. 5.47, 48, 49). Эти значения как для $\lambda = 1$, так и для $\lambda = 2$ будут следующие ¹⁾:

$$\bar{\Gamma}_{\lambda} \Gamma_{\lambda} = \frac{E_0}{\epsilon}, \quad \bar{\Gamma}_{\lambda} \gamma_4 \Gamma_{\lambda} = 1, \quad \bar{\Gamma}_{\lambda} \gamma \Gamma_{\lambda} = -i \frac{v}{c} = -i \frac{\hbar c}{\epsilon}. \quad (34)$$

Вследствие этого из (33) и (33a) получается:

$$\sum_{\lambda} = 2N^2 N_0^2 \left[\frac{E_0}{\epsilon} P_1 + P_2 - \frac{i\hbar c}{\epsilon} (k P_3) \right]$$

¹⁾ Общий множитель $\Gamma_{\text{норм}}$, который следовало бы добавить в правой части всех трёх равенств (34) на основании упомянутых равенств гл. IV, может быть уже здесь опущен. Знаменатель E , имевшийся там, в (34) заменён через ϵ .

или, если вставить значение P из (336):

$$\sum_1 = \frac{2N^2 N_0^2}{\varepsilon} \{ (\varepsilon - E_0) (B_0 B_0^*) + (\varepsilon + E_0) [B_1 B_1^* + (B_2 B_2^*) - \\ - i\hbar c (k [B_0 B_2^*] + (kB_0) B_1^* - \text{сопряжённое})] \}. \quad (35)$$

Это выражение, подставленное в (33), даёт окончательное представление для фотоэлектрической плотности, представление, которое не содержит в себе величин γ (отвлекаясь от опущенного множителя $\Gamma_{\text{горн}}$). Дальше остаётся лишь обсудить полученное таким образом представление.

Ж. Разделение на «аксиально-симметричную» и «аксиально-несимметричную» составные части. На основании (21) имеем:

$$(B_0 B_0^*) = |J_0|^2, \quad B_1 B_1^* = |(p, J_1 + J_2)|^2.$$

Используя известную формулу векторного анализа ¹⁾, получим:

$$(B_2 B_2^*) = |J_1 - J_2|^2 - |(p, J_1 - J_2)|^2.$$

Далее

$$k [B_0 B_2^*] = -(kp) J_0 (p, J_1 - J_2) + J_0 (k, J_1 - J_2),$$

$$(kB_0) B_1^* = -(kp) J_0 (p, J_1 + J_2).$$

Подстановка в (35) даёт:

$$\sum_1 = 2N^2 N_0^2 \{ (\varepsilon - E_0) |J_0|^2 + (\varepsilon + E_0) \{ |J_1 - J_2|^2 + |(p, J_1 + J_2)|^2 - \\ - |(p, J_1 - J_2)|^2 - i\hbar c \{ J_0 (k, J_1 - J_2) - \\ - 2(kp) J_0 (p, J_1) - \text{сопряжённое} \} \} \}. \quad (36)$$

Выражение, заключённое в [], может быть разделено на «аксиально-симметричную часть» $|]_s$, зависящую лишь от ϑ , и «аксиально-несимметричную часть» $|]_n$, зависящую также и от φ , которая характеризуется привычным уже выражением $(pk)^2 = k^2 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi$. На основании (36) имеем:

$$[]_s = (\varepsilon - E_0) |J_0|^2 + (\varepsilon + E_0) |J_1 - J_2|^2 - i\hbar c \{ J_0 (k, J_1 - J_2) - \\ - J_0^* (k, J_1 - J_2) \}.$$

Это выражение может быть записано в виде квадрата, если принять во внимание закон сохранения энергии в форме

$$\hbar^2 k^2 c^2 = (\varepsilon - E_0)(\varepsilon + E_0).$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что предпоследнее равенство может быть записано в виде:

$$[]_s = \frac{\hbar^2 c^2}{\varepsilon + E_0} |K_1|^2, \quad K = kJ_0 + i \frac{\varepsilon + E_0}{\hbar c} (J_1 - J_2). \quad (37)$$

С другой стороны, на основании (36) имеем:

$$[]_n = (\varepsilon + E_0) \{ |(p, J_1 + J_2)|^2 - |(p, J_1 - J_2)|^2 \} + \\ + 2i\hbar c (kp) \{ J_0 (p, J_1) + J_0^* (p, J_1) \}.$$

¹⁾ $(|AB| |ED|) = (AE)(BD) - (BE)(AD)$; для применения этой формулы в тексте надо положить

$$A = B = p, \quad E = D^* = J_1 - J_2.$$

После простого вычисления это равенство принимает вид:

$$\begin{aligned} |n\rangle &= 2 \{K_2(p, J_1) + \text{сопряжённое}\}, \\ K_2 &= (\varepsilon + E_0)(pJ_2) + i\hbar c(kp)J_0. \end{aligned} \quad (38)$$

Нам известно, что в предельном нерелятивистском случае $\beta \ll 1$ симметричная часть (37) должна исчезнуть, а несимметричная часть (38) должна свестись к известной из § 4 формуле. По-другому будет обстоять дело в предельном релятивистском случае $\beta \sim 1$, когда обе части, как это будет показано, имеют один порядок величины.

3. Предельный случай очень жёсткого облучения $\beta \sim 1$. Так как теперь необходимо сохранить все степени β , то разумно величину $|n|$ рассматривать как малую. Именно, на основании (14а) имеет место равенство

$$|n| = \frac{\alpha Z}{\beta} \sim \alpha Z.$$

Следовательно, если бы стали в выражениях для K_1 и K_2 сохранять члены с множителем $|n|^2$, то мы должны были бы сохранять и члены с $(\alpha Z)^2$, для которых использованное нами приближение несправедливо.

Воспользуемся значением для J из (22а), (22б) и значением для B^1 из (4.17а):

$$B = 4\pi \frac{a^n}{(a+b)^{n+1}} \begin{cases} a = (q - ik)^2 + x^2, \\ a + b = q^2 + (x - k)^2, \\ \text{где } q = \frac{\varepsilon_0 \alpha Z}{\hbar c} \text{ [уравнение (3)].} \end{cases} \quad (39)$$

Отсюда с учётом того, что $(pk) = 0$, легко получается:

$$(pJ_1) = i\alpha Z (pk) \frac{n+1}{a+b} B, \quad (39а)$$

$$(pJ_2) = i\alpha Z (pk) \frac{\varepsilon_0}{c} \frac{n}{a} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) B, \quad (39б)$$

$$\hbar c J_0 = -2\alpha Z \varepsilon_0 \left[\frac{n}{a} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) - \frac{n+1}{a+b} \right] B, \quad (39в)$$

$$K_2 = 2i\alpha Z (pk) \varepsilon_0 \left[\left(\frac{\varepsilon + E_0}{2\varepsilon} - 1\right) \frac{n}{a} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) + \frac{n+1}{a+b} \right] B. \quad (40)$$

До сих пор расчёт велся точно. Мы можем, не ограничивая общности, с требуемой степенью точности [пренебрежение величинами порядка $(\alpha Z)^2$] ε_0 заменить через E_0 , так как на основании формулы тонкой структуры имеет место равенство

$$\varepsilon_0 = E_0 (1 - \alpha^2 Z^2)^{1/2}. \quad (41)$$

Далее, можно пренебречь n по сравнению с 1 и 1 по сравнению с $\frac{ik}{q} = \frac{1}{n \sqrt{1-\beta^2}}$. В результате получается:

$$K_2 = 2i\alpha Z (pk) E_0 \left[\frac{1 - \sqrt{1-\beta^2}}{2 \sqrt{1-\beta^2}} \frac{1}{a} + \frac{1}{a+b} \right] B. \quad (42)$$

1) Изменение обозначения, именно написание a вместо c , в (4.17а) вызвано тем, что в последующем c будет употреблено для обозначения скорости света.

Необходимо ещё подставить сюда значения a и $a+b$ из (39). При этом следует принять во внимание, что на основании (41) имеет место неравенство $k \gg q$, так что можно положить

$$a = x^2 - k^2. \quad (42a)$$

Далее, с учётом закона Эйнштейна имеем:

$$\left. \begin{aligned} a+b &= (x^2 + k^2)(1 - \beta \cos \theta), \\ x^2 - k^2 &= \frac{2E_0(E_0 - \varepsilon)}{h^2 c^2}, \quad x^2 + k^2 = \frac{2\varepsilon(\varepsilon - E_0)}{h^2 c^2}. \end{aligned} \right\} \quad (42b)$$

Поэтому из (42) при замене ещё ε через E_0 и β следует:

$$K_2 = i\alpha Z(p\hbar) \frac{h^2 c^2}{E_0} \left(-\frac{1}{2} + \frac{1-\beta^2}{1-\sqrt{1-\beta^2}} \frac{1}{1-\beta \cos \theta} \right) B. \quad (43)$$

Для (pJ_1) получается из (39a) после соответствующего подсчёта следующее выражение:

$$(pJ_1) = -i\alpha Z(p\hbar) \frac{h^2 c^2}{2E_0^2} \frac{1-\beta^2}{1-\sqrt{1-\beta^2}} \frac{B^*}{1-\beta \cos \theta}. \quad (44)$$

Отсюда на основании (38) найдём:

$$\begin{aligned} |I_n| &= 2\alpha^2 Z^2 (p\hbar)^2 \frac{h^4 c^4}{E_0^4} \frac{(1-\beta^2)^2}{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2} \times \\ &\quad \times \left(-\frac{1}{2} \frac{1-\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta^2} + \frac{1}{1-\beta \cos \theta} \right) \frac{BB^*}{1-\beta \cos \theta}. \end{aligned} \quad (45)$$

Взяв значение BB^* из (39), окончательно получим:

$$\begin{aligned} |I_n| &= 8\pi^2 \alpha^2 Z^2 \beta^2 \frac{h^6 c^6}{E_0^6} \frac{(1-\beta^2)^2}{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2} \times \\ &\quad \times \left(-\frac{1}{2} \frac{1-\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta^2} + \frac{1}{1-\beta \cos \theta} \right) \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1-\beta \cos \theta)^2}. \end{aligned} \quad (46)$$

При помощи аналогичного вычисления из (37) найдём:

$$|I_s| = 2\pi^2 \alpha^2 Z^2 \beta^2 \frac{h^6 c^6}{E_0^6} \frac{(1-\beta^2)^2}{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2} \frac{\sin^2 \theta}{(1-\beta \cos \theta)^2}. \quad (47)$$

Ввиду того, что в последнее выражение не входит угол φ , мы и назвали эту часть «аксиально-симметричной».

Сумма (46) и (47), если обозначить множитель перед скобками в (46) через F , будет равна

$$\begin{aligned} |I_s| + |I_n| &= \frac{F}{4} \frac{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2}{(1-\beta^2)^2} \frac{\sin^2 \theta}{(1-\beta \cos \theta)^2} - \\ &\quad - \frac{F}{2} \frac{1-\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta^2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1-\beta \cos \theta)^2} + \frac{F \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(1-\beta \cos \theta)^2}. \end{aligned} \quad (48)$$

Последний член даёт хорошо известную нам нерелятивистскую фотоэмиссию с K -оболочки; оба первых члена представляют релятивистские эффекты, которые тем сильнее, чем меньше β отличается от единицы; отклонение электронов вперёд, даваемое этими членами, менее значительно, чем отклонение,

даваемое нерелятивистскими членами (третья степень знаменателя $1 - \beta \cos \vartheta$ вместо четвертой). Все три члена впервые были найдены Заутером ¹⁾ несколько другим путём. Представляет интерес следующее сопоставление: знаменатель $(1 - \beta \cos \vartheta)^4$ в последнем члене в (48) релятивистски точен, коль скоро β вычисляется из разности потенциалов по формулам релятивистской механики, следовательно, этот член более точен, чем ранее найденная форма $(1 - \beta \cos \vartheta + \gamma)^4$, которая получилась при нерелятивистском определении β в (4.20a). Уже там было замечено, что малый поправочный член γ при нерелятивистском расчёте не может быть гарантирован. Теперь оказалось, что при строгом расчёте этот член пропадает. Это было подтверждено при анализе наблюдений Лутце (стр. 374).

¹⁾ F. Sauter, Ann. d. Phys. 11, 454 (1931), формула (30).

ГЛАВА VII СПЛОШНОЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ СПЕКТР

§ 1. ИСТОРИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ И ОБЗОР

Первые теоретические представления о происхождении рентгеновских лучей (Стокс, Вихерт) относились к вынужденной части излучения, вызванного бомбардировкой катодными лучами («белый рентгеновский свет», ср. т. I, гл. I, § 5). Автор предложил (и Рентген согласился) назвать это явление *тормозным излучением*. Его жёсткость возрастает с напряжением, приложенным к трубке, и не зависит от вещества антикатада. Для рентгеновской техники это тормозное излучение играет главную роль.

Характеристическая часть рентгеновских лучей, которая соответствует свободным атомным колебаниям, была обнаружена впервые в 1906 г. (Баркла). Жёсткость этого излучения в принципе не зависит от напряжения (последнее влияет лишь вторичным образом, вызывая сдвиг границы возбуждения).

После открытия Лауэ стало известно, что первая часть излучения обладает сплошным спектром частот, вторая — дискретным. Сплошной спектр имеет коротковолновую границу, определяемую квантовым уравнением

$$h\nu_{\text{макс}} = eV \quad (V \text{ — напряжение на трубке}). \quad (1)$$

Классические представления о торможении, конечно, ничего не могут сказать об этой фундаментальной зависимости. Напротив, эта зависимость дала возможность, по крайней мере, качественно понять одну особенность в пространственном распространении тормозного излучения: опережение максимума излучения, впервые наблюдавшееся Басслером ¹⁾ в 1908 г. и Штарком ²⁾ в 1909 г. В т. I на рис. 11 мы изобразили явление согласно более новым опытам ³⁾, в которых в качестве антикатада применялись очень тонкие плёнки (старые опыты были проделаны с толстыми антикатадами и поэтому наблюдениям мешали вторичные процессы). Этот рисунок похож на рис. 26 в этом томе для фотоэффекта, несмотря на различный характер излучения в обоих случаях: при фотоэффекте возбуждение производится электромагнитным излучением, возбуждённое излучение состоит из электронов; в случае сплошного рентгеновского спектра наблюдается обратная картина.

В предварительной теории автора остался один неопределённый параметр — «тормозной путь» l , трактованный как субатомная длина, распо-

¹⁾ Bassler, Ann. d. Phys. 28, 808 (1909).

²⁾ J. Stark, Phys. Zs. 10, 902 (1909). Там же теоретическое объяснение опережения, данное автором (стр. 969), и сразу же за этим дискуссия Штарка и Зоммерфельда.

³⁾ H. Kulenkampff, Ann. d. Phys. 57, 597 (1928). Краткое изложение в Handb. d. Phys., Bd. 23/2, 2-е изд. (1933).

ложенная вдоль направления падения катодных лучей. Эквивалентом тормозного пути l является «время торможения» $\tau = l/\bar{v}$, где \bar{v} — средняя по времени скорость падающих катодных лучей на тормозном пути. Автор попытался найти эту величину с помощью особого вводимого ad hoc постулата, взятого первоначально в виде (E — начальная энергия электрона)

$$E\tau = h \quad (2)$$

или же в виде ($E_{кин}$ — кинетическая энергия электрона, теряемая им во время торможения):

$$\int_0^{\tau} E_{кин} dt = h. \quad (2a)$$

Отметим при этом, что (2a) было в некотором смысле прообразом появившегося позднее фазового интеграла

$$\oint p dq = h; \quad (26)$$

в релятивистском смысле (2a) является четвертой компонентой (26).

Конечно, из этого постулата ещё не следовала фундаментальная формула (1), с помощью которой объясняется (в то время ещё не известная) коротковолновая граница спектра. Но он даёт простой способ объяснить два других опытных факта, а именно: а) пропорциональность интенсивности рентгеновского излучения квадрату напряжения, приложенного к трубке, и б) малую степень превращения при переходе энергии катодных лучей в энергию рентгеновского излучения.

а) Из классической формулы для излучения

$$S = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \dot{v}^2 \quad (3)$$

следует для энергии E_p , испущенной в течение всего процесса торможения от $t=0$ до $t=\tau$, при условии, что \dot{v} постоянно, т. е. равно $-v/\tau$, где v — начальная скорость электрона,

$$E_p = \int_0^{\tau} S dt = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{v^2}{\tau}. \quad (3a)$$

Отсюда, принимая во внимание (2) и $E = \frac{mv^2}{2}$, можно получить:

$$E_p = \frac{4}{3} \frac{e^2}{mc^3} \frac{E^2}{h}, \quad (36)$$

т. е. пропорциональность E^2 , а значит, и V^2 [V — напряжение, приложенное к трубке, как в (1)].

б) Одновременно из (36) следует:

$$\frac{E_p}{E} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{hc} \frac{v^2}{c^2} = \frac{\alpha}{3\pi} \beta^2,$$

следовательно, например, при $\beta = 1/3$ (соответствует $V = 30$ кэ)

$$\frac{E_p}{E} = \frac{1}{3\pi} \frac{1}{137} \frac{1}{9} \sim 10^{-4}. \quad (3b)$$

Это и есть впервые измеренная Вином ¹⁾ поразительно малая степень превращения катодного излучения в рентгеновское.

Когда автор докладывал об этом подходе к решению задачи на первом Сольвейевском конгрессе (1911 г.), Эйнштейн сделал одно интересное замечание: он предложил в качестве альтернативы рассматривать квантовым путём акт излучения, оставив процесс торможения неопределённым [в то время как в вышеупомянутом расчёте квантовый характер приписывается, наоборот, атомному процессу — уравнение (2), а излучение считается классическим — уравнение (3)].

Можно, например, вместе с Эйнштейном рассматривать процесс торможения как мгновенный и, следовательно, использовать приведённый рядом рисунок. То же самое получается, если разложить v в ряд Фурье в произвольном временном интервале T :

$$v(t) = \frac{v}{2} - \frac{2v}{\pi} \sum_{n=1, 3, 5, \dots} \frac{1}{n} \sin \frac{2\pi n t}{T}. \quad (4)$$

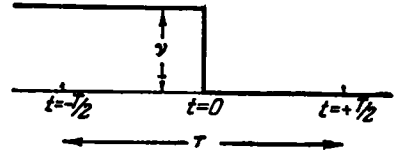


Рис. 29. Разложение Фурье мгновенного процесса торможения по Эйнштейну.

Отсюда получается дифференцированием по t , очевидно, расходящийся ряд. Эйнштейн обрывает его на некотором члене с $n = N$ и пишет:

$$\dot{v}(t) = -\frac{4v}{T} \sum_{n=1, 3, \dots, N} \cos \frac{2\pi n t}{T}, \quad (4a)$$

считая, что высшие члены с $n > N$ ничего к излучению не прибавляют.

Граничное число N определяется следующим образом: очевидно, частота колебаний, соответствующая отдельному члену ряда Фурье, даётся выражением

$$\nu = \frac{n}{T}. \quad (4б)$$

Максимальная частота колебаний, возможная при начальной энергии E , определяется квантовым постулатом

$$E = h\nu_{\text{макс}}. \quad (4в)$$

Этому $\nu_{\text{макс}}$ соответствует, согласно (4б), $n_{\text{макс}}$, которое и является искомым граничным N , а именно:

$$N = \frac{E}{h} T. \quad (4г)$$

Согласно (3) каждый член разложения Фурье (4а) даёт излучение

$$S = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{16v^2}{T^2} \int_{-T/2}^{+T/2} \cos^2 \frac{2\pi n t}{T} dt = \frac{16}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{v^2}{T}.$$

[Образующиеся при возведении в квадрат (4а) произведения членов не дают никакого излучения.]

Полная энергия излучения E_p , учитывая (4г) и связь с v^2 , выразится в виде:

$$E_p = NS = \frac{16}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{v^2 E}{h} = \frac{32}{3} \frac{e^2}{mc^3} \frac{E^2}{h}. \quad (4д)$$

¹⁾ W. Wien, Ann. d. Phys. 18, 911 (1905); Beattie, Proc. Roy. Soc. 89, 314 (1913); ср. также O. W. Richardson, Zeeman-Festschrift, стр. 80, Haag, 1935.

Это совпадает (с точностью до несущественного числового множителя) с (36). Одновременно получается также и найденный выше в (3в) порядок величины для степени превращения E_p/E .

Мы привели здесь этот несколько смелый эйнштейновский метод обрезания, так как он явился первым примером способа, который с тех пор всегда применяется (за неимением лучшего), когда взодят расходящееся выражение (в частности, для отрицательных уровней энергии в теории Дирака; ср. гл. IV, стр. 268). Паули при случае называет такие способы несколько пренебрежительно «вычитательной физикой».

Так как в проблемах тормозных спектров речь всегда идёт об интенсивностях, то последовательное решение этих вопросов возможно лишь на основе принципа соответствия или, строго говоря, лишь на основе волновой механики. Удачное решение, основанное на принципе соответствия, дал Крамерс¹⁾. Его результаты, важные для астрофизики, будут обсуждены в § 8. Волномеханическое исследование вопроса было предпринято с различных сторон²⁾. Оппенгеймер показал, что особенно удобны параболические координаты, в которых уравнение Шредингера для атома водорода допускает разделение переменных, и использовал в качестве полной системы функций собственные функции этой задачи. Простое представление получил автор, используя собственные функции в параболических координатах, которые были уже нами использованы при рассмотрении фотоэффекта. Но прежде чем обсудить результаты, достигнутые с этими собственными функциями, мы хотим описать методы волновой механики в данном случае и сравнить их с методами, основанными на принципе соответствия.

Волномеханически начальное состояние системы изображается некоторой приходящей из бесконечности плоской волной, которая будет рассеиваться в кулоновском поле ядра. Вопрос, попадёт ли электрон в центральную или периферическую часть атома, вовсе не ставится. Все отдельные возможности столкновения будут соединены в единой волновой картине.

Точно так же конечное состояние, в котором электрон с уменьшенной скоростью покидает атом, будет описано плоской волной, тоже искажённой атомным ядром. Направление распространения волны, т. е. направление выходящего электрона, остаётся неопределённым; а priori каждое направление является равновероятным.

Чтобы рассчитать теперь интенсивность излучения при переходе из начального в конечное состояние, надо лишь составить из соответствующих волновых функций по правилам волновой механики матричный элемент. О самом способе перехода при этом не требуется делать никаких предположений, так же как и в теории линейных спектров не требуется специализировать процесс перехода из начального в конечное состояние.

Отличие этого волномеханического метода от квазиклассического бросается в глаза: в последнем мы имеем излучение, причиной которого является изменение скорости вдоль классической траектории (гипербола); в первом довольствуются сопоставлением начального и конечного положений, причём происхождение излучения остаётся неизвестным. Заметим, в частности, также следующее: при вычислении матричного элемента интегрируют по всему пространству. Мы должны, следовательно, принимать в расчёт волновую функцию падающего электрона не только *перед* атомом, но и *позади* атома, куда

¹⁾ H. A. Kramers, Phil. Mag. 46, 836 (1923).

²⁾ J. R. Oppenheimer, Zs. f. Phys. 55, 725 (1929); Y. Sugiura, Phys. Rev. 34, 858 (1929); J. A. Gaunt, Proc. Roy. Soc. 128, 654 (1930); A. Sommerfeld, Ann. d. Phys. 11, 257 (1931).

электрон по нашим физическим представлениям совсем не попадает. С другой стороны, мы должны использовать волновую функцию вылетающего электрона не только *за* атомом, т. е. там, куда он вылетает, но также *перед* атомом, где его существование нельзя наглядно представить. Следовательно, волномеханический метод в противоположность классическому отказывается от модельного представления физического процесса.

В § 2 мы вычислим матричный элемент новым способом, более коротким и менее искусственным, чем предложенный автором ранее. Полученные таким образом простые замкнутые формулы описывают *элементарный процесс*, при котором электрон с определённым уменьшением скорости вылетает в заданном направлении (характеризуемом углами α , β) и наблюдается световой квант в определённом направлении ϑ , φ . Интегрируя по всем направлениям α , β , получим в § 3 сплошной рентгеновский спектр, его интенсивность и поляризацию. Это интегрирование будет выполнено не точно, а приближённо для достаточно жёстких катодных лучей, причём, нерелятивистский характер расчёта ограничивает жёсткость сверху. В § 4 будет дополнительно показано, что «полная потеря излучения», т. е. проинтегрированная по всем направлениям вылета α , β сумма квадратов всех трёх компонент матричного элемента, может быть вычислена точно. В § 5, наоборот, при заданном α , β мы проинтегрируем по всем направлениям излучения ϑ , φ , причём получится угловое распределение вылетающих электронов как функция углов α , β .

Но метод матричных элементов является лишь первым приближением. Он должен быть дополнен *методом вектор-потенциала*, который позволяет учесть «запаздывание» для более жёстких падающих электронов и, следовательно (ср. стр. 60), позволяет наряду с дипольным принять во внимание и мультипольное излучение. Это более полное рассмотрение излучения сделано в § 6 тем же способом, что и расчёт матричного элемента в § 2, и приводит к более сложным выражениям. Но если мы опять ограничимся жёсткими катодными лучами и, в частности, границей сплошного рентгеновского спектра, то получим ясную картину поля излучения. Затем производится сравнение теоретически полученного опережения, о котором говорилось выше, с соответствующими экспериментальными данными.

Однако и этот метод является только приближением. Законченный метод для жёстких лучей даёт лишь теорией Дирака, которая, однако, приводит в общем случае к довольно громоздким формулам. Поэтому мы ограничимся предельным случаем очень больших скоростей как первичных, так и вторичных электронов (борновское приближение). Используя новый способ, мы вновь получим результаты Заутера¹⁾ и Бете и Гайтлера²⁾, результаты, которые имеют очень важное значение для теории космических лучей.

Обратное приближение, относящееся к медленным частицам и мягким рентгеновским лучам, будет рассмотрено в § 8. Там мы, ссылаясь на Шерцера³⁾, разберём интересный вопрос, почему ещё никогда не наблюдали заметного рентгеновского излучения при торможении протонов. Все наши расчёты сильно схематизированы, так как они не принимают во внимание электронную оболочку и оперируют лишь с голым ядром. Для малых скоростей *падающих* электронов это является безусловно недопустимым. При больших скоростях также возможна ошибка в определении коротковолновой границы сплошного спектра, так как в соответствии с определением

¹⁾ F. Sauter, Ann. d. Phys. 20, 404 (1934).

²⁾ H. Bethe и W. Heitler, Proc. Roy. Soc. 146, 83 (1934).

³⁾ O. Scherzer, Münchener Dissertation; Ann. d. Phys. 13, 137 (1932).

скорость *вылетающего* электрона при этом равна нулю. Поэтому надо в собственной функции заторможенного электрона учесть экранирование электронной оболочки. Это, повидимому, объясняет найденную в работе Бруннера ¹⁾ выпуклость в ходе сплошного спектра.

§ 2. МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ПРОЦЕССА

Пусть в начальном состоянии скорость и волновое число электрона будут v_1 и k_1 , а в конечном состоянии v_2 и k_2 . Направление движения падающего электрона примем за ось x , направление вылетающего электрона будем характеризовать углами α и β , где α — угол между k_2 и осью x (полярный угол), β — угол вокруг оси x (азимутальный угол):

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= \frac{mv_1}{h}, & k_1 &= (1, 0, 0) k_1, \\ k_2 &= \frac{mv_2}{h}, & k_2 &= (\cos \alpha, \sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta) k_2, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

причём

$$v_2 < v_1, \quad k_2 < k_1.$$

Энергия, излученная при этом процессе торможения, и соответствующее ей волновое число даются выражениями:

$$\left. \begin{aligned} h\nu &= \frac{m}{2} (v_1^2 - v_2^2) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 - k_2^2), \\ x &= \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{\hbar}{2mc} (k_1^2 - k_2^2). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Напряжение V , приложенное к трубке, определяется из соотношения

$$eV = \frac{m}{2} v_1^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k_1^2. \quad (3)$$

Мы производим расчёт с водородными собственными функциями, причём атом рассматриваем как голое ядро. Тогда можно использовать в качестве волновой функции падающего электрона выражение (VI.4.2), а в качестве волновой функции вылетающего электрона (ср. доказательство на стр. 389) — (VI.4.3); следовательно, имеем:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= e^{i(k_1 r)} L_n(\rho_1), & \rho_1 &= l [k_1 r - (k_1 r)], \\ \psi_2 &= e^{i(k_2 r)} L_{-n_2}(-\rho_2), & \rho_2 &= l [k_2 r + (k_2 r)], \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\psi_2^* = e^{-i(k_2 r)} L_{n_2}(\rho_2), \quad (5)$$

$$n_1 = \frac{Z}{ik_1 a} = \frac{aZ}{l\beta_1}, \quad n_2 = \frac{Z}{ik_2 a} = \frac{aZ}{l\beta_2}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (6)$$

ψ_1 и ψ_2^* удовлетворяют уравнениям Шредингера

$$\left. \begin{aligned} \Delta\psi_1 + k_1^2\psi_1 - \frac{2m}{\hbar^2} U\psi_1 &= 0, \\ \Delta\psi_2^* + k_2^2\psi_2^* - \frac{2m}{\hbar^2} U\psi_2^* &= 0, \end{aligned} \right\} U = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (6a)$$

¹⁾ E. Brunner, Phys. Rev. 53, 451 (1938).

Потенциальная энергия в поле ядра обозначена здесь через U , так как буква V уже использована для обозначения напряжения на трубке в уравнении (3).

В этом параграфе не рассматривается жёсткое излучение, поэтому можно отказаться от введения «запаздывания» (случай А на стр. 57) и использовать метод матричного элемента; при этом, конечно, пропадёт интересный эффект опережения. Матричный элемент для перехода $1 \rightarrow 2$ представится в виде:

$$M = \int \psi_1 r \psi_2^* d\tau. \quad (7)$$

Аналогично получится и сопряжённое выражение.

Сначала мы займёмся одним простым интегралом, к которому позже сведём вычисление нашего матричного элемента (7), а именно:

$$X = \int \psi_1 \psi_2^* \frac{d\tau}{r}. \quad (8)$$

Подставляя сюда (4) и (5), получим:

$$X = \int e^{i(qr)} L_{n_1}(\rho_1) L_{n_2}(\rho_2) \frac{d\tau}{r}, \quad q = k_1 - k_2. \quad (8a)$$

Обозначение q введено здесь не только для более краткой записи, но прежде всего по некоторым причинам, которые станут ясны позже [уравнение (21a)]. Для функций L используем выражение (VI.4.15б), заменив в нём переменную интегрирования x через $u+1$ (в L_{n_1}) и через $v+1$ (в L_{n_2}). Вследствие этого получим:

$$X = \frac{1}{2\pi i} \oint u^{-n_1-1} (u+1)^{n_1} du \frac{1}{2\pi i} \oint v^{-n_2-1} (v+1)^{n_2} dv \times \\ \times \int_0^\infty e^{-Kr} r dr \int e^{i(Kr)} d\omega, \quad (9)$$

где

$$K_0 = i(k_1 v + k_2 u), \quad K = k_1 v - k_2 u + q. \quad (10)$$

Интеграл по $d\omega$ имеет точно такой же вид, как интеграл Ω в (VI.4.16a), и поэтому даётся выражением (VI.4.16в). Интегрирование по r производится точно так же, как в (VI.4.16д). Таким образом, имеем:

$$\int_0^\infty e^{-Kr} r dr \int e^{iKr \cos \theta} d\omega = \frac{4\pi}{K_0^2 + K^2}. \quad (11)$$

Из (10) имеем (к счастью, квадраты u и v уничтожаются):

$$K_0^2 + K^2 = q^2 - 2(qk_2)u + 2(qk_1)v - 2[k_1 k_2 + (k_1 k_2)]uv.$$

Расположим это выражение по v и запишем в виде:

$$K_0^2 + K^2 = U(v - v_0), \quad (12)$$

где

$$\left. \begin{aligned} U &= 2(qk_1) - 2[k_1 k_2 + (k_1 k_2)]u, \\ Uv_0 &= 2(qk_2)u - q^2. \end{aligned} \right\} \quad (12a)$$

Подставляя (11) и (12) в (9), получаем:

$$X = \frac{2}{i} \oint u^{-n_1-1} (u+1)^{n_1} \frac{du}{U} \frac{1}{2\pi i} \oint v^{-n_1-1} (v+1)^{n_1} \frac{dv}{v-v_0}. \quad (13)$$

Интеграл по v можно взять с помощью теоремы о вычетах, если, сначала обойдя точки 0 и -1 , стянуть контур к точке $v=v_0$, что возможно, когда подынтегральное выражение в бесконечности убывает, как $1/v^2$; при этом получаем:

$$X = 2i \oint u^{-n_1-1} (u+1)^{n_1} v_0^{-n_1-1} (v_0+1)^{n_1} \frac{du}{U}. \quad (14)$$

Мы можем это выражение заменить на

$$X = 2i \oint u^{-n_1-1} (u+1)^{n_1} (Uv_0)^{-n_1-1} (Uv_0+U)^{n_1} du. \quad (14a)$$

Подынтегральное выражение имеет четыре точки ветвления: $u=u_0, u_1, u_2, u_3$, а именно [ср. (12a)]:

$$\left. \begin{aligned} u_0 = 0, \quad u_1 = -1, \quad u_2 = \frac{q^2}{2(qk_2)} \text{ (соответствуют } Uv_0 = 0); \\ u_3 = \frac{1}{2} \frac{q^2 - 2(qk_1)}{(qk_2) - k_1k_2 - (k_1k_2)} \text{ (соответствует } Uv_0 + U = 0); \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

$u = \infty$, напротив, — регулярная точка, так как в ней подынтегральное выражение убывает, как u^{-3} .

Ангармоническое отношение четырёх точек ветвления u_0, u_1, u_2, u_3 есть

$$y = \frac{u_1 - u_0}{u_1 - u_2} : \frac{u_3 - u_0}{u_3 - u_2} = \frac{u_3 - u_2}{u_2(1 + u_3)}; \quad (16)$$

подставляя сюда (15), получим:

$$y = 2 \frac{q^2 \{k_1k_2 + (k_1k_2)\} - 2(qk_1)(qk_2)}{\{q^2 - 2(qk_1)\} \{q^2 + 2(qk_2)\}}. \quad (16a)$$

Это выражение упрощается для $q = k_1 - k_2$. Принимая во внимание (1), имеем:

$$\left. \begin{aligned} q - 2(qk_1) &= k_2^2 - k_1^2, & q^2 + 2(qk_2) &= k_1^2 - k_2^2, \\ (qk_1) &= k_1(k_1 - k_2 \cos \alpha), & (qk_2) &= k_2(k_1 \cos \alpha - k_2), \\ q^2 &= k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2 \cos \alpha. \end{aligned} \right\} \quad (16b)$$

На основании этого (16a) превращается в

$$x = -\frac{4k_1k_2}{(k_1 - k_2)^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (16b)$$

Отметим ещё, что

$$q^2 = (k_1 - k_2)^2 (1 - x). \quad (16g)$$

Чтобы привести интеграл (14a) к известному виду, сделаем линейное преобразование $u \rightarrow s$, такое, чтобы точкам ветвления $u_0 = 0, u_1 = -1, u_2$ соответствовали значения $s = 0, 1, \infty$. Таким преобразованием, очевидно, является

$$u = \frac{u_2 s}{s - 1 - u_2}. \quad (17)$$

Так как при преобразовании ангармоническое отношение остаётся неизменным, то с его помощью можно получить четвёртую точку ветвления s_3 по схеме (16):

$$y = \frac{s_1 - s_0}{s_1 - s_2} : \frac{s_3 - s_0}{s_3 - s_2} = \frac{1}{s_3}.$$

Следовательно, наши четыре точки ветвления в переменных s будут:

$$s_0 = 0, s_1 = 1, s_2 = \infty, s_3 = \frac{1}{y}. \tag{17a}$$

При преобразовании интеграла (14a) используем наряду с (17)

$$\left. \begin{aligned} du &= -\frac{u_2(1+u_2)}{(s-1-u_2)^2} ds, & 1+u &= -\frac{(1+u_2)(1-s)}{s-1-u_2}, \\ Uv_0 &= \frac{q^2(1+u_2)}{s-1-u_2}, & Uv_0+U &= \frac{\{q^2-2(qk_1)\}(1+u_2)}{s-1-u_2}(1-ys). \end{aligned} \right\} \tag{17c}$$

Подставляя в (14a), получаем:

$$X = C \oint s^{-n_2-1}(1-s)^{n_2}(1-ys)^{n_1} ds, \tag{18}$$

$$C = -2ie^{-in_1} \frac{\{q^2-2(qk_1)\}^{n_1} \{q^2+2(qk_2)\}^{n_2}}{q^{2(n_1+n_2+1)}}. \tag{18a}$$

Формула (18) — хорошо известное [дополнение 16, уравнение (14)] представление гипергеометрической функции. Сравнение экспонент обоих выражений даёт для гауссовских параметров α, β, γ уравнения

$$\alpha - 1 = -n_2 - 1, \quad \gamma - \alpha - 1 = n_2, \quad -\beta = n_1;$$

следовательно,

$$\alpha = -n_2, \quad \beta = -n_1, \quad \gamma = 1.$$

Мы можем, следовательно, вместо (18) написать ¹⁾:

$$X = BF(-n_1, -n_2, 1, y). \tag{19}$$

Так как коэффициент, указанный в дополнении 16, уравнении (4a), включён в константу в (18a), то получаем:

$$B = 4\pi \frac{\{q^2-2(qk_1)\}^{n_1} \{q^2+2(qk_2)\}^{n_2}}{q^{2(n_1+n_2+1)}}. \tag{19a}$$

Для $q = k_1 - k_2$ отсюда следует:

$$X = AF(-n_1, -n_2, 1, x). \tag{19b}$$

где значение x берётся из (16b). Выражение для A получается из B на основании (16b, г):

$$A = \frac{4\pi e^{-in_1}}{(k_1 - k_2)^2} \left(\frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} \right)^{n_1+n_2} (1-x)^{-n_1-n_2-1}. \tag{19b}$$

Теперь мы подготовлены к вычислению ²⁾ нашего первоначального матрич-

¹⁾ Так как F , представленное в виде ряда, симметрично по обоим параметрам α и β , то можно переставить $-n_2$ и $-n_1$.

²⁾ Мы используем здесь и в § 6 часть неопубликованных результатов (G. Eiwert, Münchener Dissertation, опубликованная часть в Ann. d. Phys. 33).

ного элемента M [уравнение (7)]. Чтобы привести его к виду (8), будем исходить из связи между матричным элементом и током в уравнении (1.8.16.) Тогда, если подставить χ из уравнения (2), получим:

$$-\frac{\hbar l}{2m} (k_1^2 - k_2^2) M = \int j d\tau. \quad (20)$$

Используем для j выражение из (1.7.15), которое получается для специального случая $A = 0$ интегрированием по частям:

$$\int j d\tau = \frac{\hbar}{im} \int \psi_2^* \text{grad} \psi_1 d\tau. \quad (20a)$$

Из сравнения (20) и (20a) следует тогда:

$$\frac{k_1^2 - k_2^2}{2} M = \int \psi_2^* \text{grad} \psi_1 d\tau. \quad (20б)$$

Преобразуем правую часть искусственным приёмом, подобным данному на стр. 392 [уравнения (13), (14)]. Прежде всего из (4) следует:

$$\left. \begin{aligned} \text{grad} \psi_1 &= ik_1 \psi_1 + e^{i(k_1 r)} L'_{n_1}(\rho_1) \text{grad} \rho_1, \\ \text{grad} \rho_1 &= i \left(k_1 \frac{r}{r} - k_1 \right) = -i \frac{k_1}{r} (k_1 r - r). \end{aligned} \right\} \quad (20в)$$

Сравним это с (grad теперь относится к составляющей по k_1)

$$\text{grad}_{k_1} \rho_1 = i \left(\frac{k_1}{r} r - r \right).$$

Следовательно,

$$\text{grad} \rho_1 = -\frac{k_1}{r} \text{grad}_{k_1} \rho_1,$$

и вместо (20в) имеем также:

$$\text{grad} \psi_1 = ik_1 \psi_1 - \frac{k_1}{r} e^{i(k_1 r)} \text{grad}_{k_1} L_{n_1}(\rho_1). \quad (20г)$$

Условимся при этом, что с n_1 при дифференцировании по k_1 можно обращаться, как с константой.

При подстановке в (20б) пропадает первый член в правой части (20г), так как ψ_1 и ψ_2 взаимно ортогональны. Тогда получим, если одновременно для ψ_2^* подставим выражение (5):

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1} M = \int e^{i(k_1 - k_2 r)} \text{grad}_{k_1} L_{n_1}(\rho_1) L_{n_2}(\rho_2) \frac{d\tau}{r}. \quad (21)$$

Здесь желательно градиент по k_1 вынести за анак интеграла. Это можно сделать, если, как в (8а), написать:

$$q = k_1 - k_2 \quad (21a)$$

и затем условиться, что кроме n_1 также и q должно рассматриваться как постоянная при образовании градиента. Тем самым вычисление матричного элемента M сводится к интегралу X уравнения (8а), а именно, имеем из (21):

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1} M = \text{grad}_{k_1} X. \quad (22)$$

где для X использовано выражение (19) и лишь после образования градиента подставлено выражение (21a) для q .

В выражении (19) от k_1 зависят только множитель B и аргумент y . Их значения для $q = k_1 - k_2$ обозначены через A и x соответственно и указаны в (19а) и (16в). Так как по k_1 мы берём логарифмическую производную, то, очевидно, можно написать:

$$\text{grad } X = AF(x) \text{grad } \ln B + AF'(x) x \text{grad } \ln y. \quad (23)$$

Из (19а) следует:

$$\text{grad } \ln B = \frac{-2n_1 q}{q^2 - 2(qk_1)}, \quad (23а)$$

Следовательно, принимая во внимание (16б) и (21а), получим:

$$\text{grad } \ln B = \frac{2n_1}{k_1^2 - k_2^2} (k_1 - k_2). \quad (23б)$$

Кроме того, из (16а) следует:

$$\text{grad } \ln y = \frac{q^2 k_2 \left(\frac{k_1}{k_1} + \frac{k_2}{k_2} \right) - 2q(qk_2)}{q^2 \{k_1 k_2 + (k_1 k_2)\} - 2(qk_1)(qk_2)} + \frac{2q}{q^2 - 2(qk_1)}. \quad (23в)$$

Знаменатели первой и соответственно второй дроби в силу (16б) равны

$$2k_1 k_2 (k_1 + k_2)^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \text{ и соответственно } k_2^2 - k_1^2.$$

При указанном в (23) умножении на x [уравнение (16в)] получаем:

$$x \text{grad } \ln y = - \frac{2}{(k_1^2 - k_2^2)^2} \left\{ q^2 k_2 \left(\frac{k_1}{k_1} + \frac{k_2}{k_2} \right) + qQ \right\}, \quad (23г)$$

где

$$Q = -2(qk_2) + (k_1^2 - k_2^2)x = -2k_2(k_1 - k_2)(1 - x);$$

для последнего преобразования надо сравнить первую строку (16в) и (16г).

Из (16г) следует, что q^2 , а следовательно, также первый член в фигурных скобках в уравнении (23г) делятся на $1 - x$. На основании этого { } с выражением для q из (23г) превращаются в

$$\begin{aligned} \{ \} &= k_2(k_1 - k_2)(1 - x) \left[(k_1 - k_2) \left(\frac{k_1}{k_1} + \frac{k_2}{k_2} \right) - 2(k_1 - k_2) \right] = \\ &= k_2(k_1^2 - k_2^2)(1 - x) \left(\frac{k_2}{k_2} - \frac{k_1}{k_1} \right). \end{aligned}$$

Подставляя это в (23г), окончательно имеем:

$$x \text{grad } \ln y = \frac{2k_2}{k_1^2 - k_2^2} (1 - x) \left(\frac{k_1}{k_1} - \frac{k_2}{k_2} \right). \quad (23д)$$

Комбинируя (23), (23б) и (23д), теперь получаем:

$$\text{grad } X = \frac{2A}{k_1^2 - k_2^2} \left[n_1 F(x)(k_1 - k_2) + k_2(1 - x) F'(x) \left(\frac{k_1}{k_1} - \frac{k_2}{k_2} \right) \right] \quad (24)$$

и по (22), если в множителе при F использовать соотношение $k_1 n_1 = k_2 n_2$:

$$M = \frac{-4Ak_1 k_2}{(k_1^2 - k_2^2)^2} \left\{ \left(n_2 \frac{k_1}{k_1} - n_1 \frac{k_2}{k_2} \right) F(x) + (1 - x) \left(\frac{k_1}{k_1} - \frac{k_2}{k_2} \right) F'(x) \right\}. \quad (25)$$

Из А, уравнение (19в), вынесем ещё множитель $(1-x)^{-n_1-n_2-1}$ и объединим то, что осталось, с постоянной в (25) в один множитель С. Следовательно, имеем:

$$M = C \{ \} (1-x)^{-n_1-n_2-1}, \quad (26)$$

$$C = -16\pi e^{-i\pi n_1} \frac{k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2 (k_1 - k_2)^4} \left(\frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} \right)^{n_1 + n_2}. \quad (26a)$$

Это и есть наш результат, написанный в общем векторном виде через M , k_1 , k_2 .

Для сравнения с прежним перейдём к координатному представлению M_x , M_y , M_z (x — направление падающего электрона; то, что мы впредь используем ту же букву для аргумента F , вероятно, не вызовет недоразумений). Подставляя из (1), получаем:

$$\left. \begin{aligned} M_x &= C [(n_2 - n_1 \cos \alpha) F + (1 - \cos \alpha)(1-x)F'] (1-x)^{-n_1-n_2-1}, \\ M_y &= -C \left\{ \begin{array}{l} \cos \beta \\ \sin \beta \end{array} \right\} \sin \alpha [n_1 F + (1-x)F'] (1-x)^{-n_1-n_2-1}. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Эти формулы совпадают с выведенными автором в 1931 г. ¹⁾ Они представляют *элементарный процесс*, торможения, который мы хотим описать следующим образом: электрон, описываемый волновой функцией, асимптотически ведущей себя, как плоская волна, падает на ядро и с уменьшением скорости $v_1 \rightarrow v_2$ отклоняется в заданном направлении α , β (электрон, покидающий поле ядра, описывается волновой функцией, переходящей на бесконечности в плоскую волну, нормаль к которой задаётся углами α , β). Одновременно атом излучает монохроматическую, «асимптотически плоскую» световую волну или, говоря иначе, световой квант в определённом направлении ϑ , φ . Мы разлагаем световое поле на две поляризованные составляющие. В одной колебания происходят в направлении возрастающих ϑ , в другой — в направлении возрастающих φ . О поляризации судят по направлению колебаний вектора напряжённости электрического поля. Наш элементарный процесс заключается в том, что одновременно испускаются электрон в направлении α , β и (определённым образом поляризованный)^{*} световой квант в направлении ϑ , φ .

Обозначим через e_ϑ , e_φ единичные векторы в направлении возрастания ϑ , φ и составим с помощью (25)

$$M_\vartheta = (M e_\vartheta), \quad M_\varphi = (M e_\varphi). \quad (28)$$

¹⁾ Различие состоит в следующем: в цитированной на стр. 424 работе [уравнение (97)] даётся в качестве гипергеометрической функции

$$F(1+n_1, 1-n_2, 1, x') \text{ с } x' = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \cos^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Она переходит с помощью замены

$$k_2, n_2, \alpha, \beta \rightarrow -k_2, -n_2, \pi - \alpha, \beta \pm \pi$$

в

$$F(1+n_1, 1+n_2, 1, x) \text{ с } x = -\frac{4k_1 k_2}{(k_1 - k_2)^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

С другой стороны, из дифференциального уравнения для гипергеометрической функции легко получить:

$$F(1+n_1, 1+n_2, 1, x) = F(-n_1, -n_2, 1, x) (1-x)^{-n_1-n_2-1}.$$

Точно так же можно перейти от функции F_1 к новой функции $F(-n_1, -n_2, 1, x)$. Таким путём уравнения (97) цитированной работы переходят в наши уравнения (26) (включая значения для x и постоянной С).

Как в гл. I, § 8 матричный элемент M_{nm} был истолкован в качестве амплитуды вероятности перехода $n \rightarrow m$, так и теперь мы должны понимать под матричными элементами M_θ , M_φ амплитуду вероятности¹⁾ элементарного процесса торможения с определёнными направлениями эмиссии α , β и ϑ , φ и определённым направлением поляризации светового кванта e_θ или e_φ . Отсюда следует, что сама вероятность даётся нормой. Она изображается для наших элементарных процессов, поляризованных по e_θ и по e_φ в виде:

$$|M_\theta|^2 \text{ и соответственно } |M_\varphi|^2 \quad (29)$$

или, если не специализировать поляризацию фотонов:

$$|M_\varphi|^2 + |M_\theta|^2. \quad (29a)$$

Чтобы выразить нашу вероятность явно через прямоугольные составляющие (27), заметим, что компоненты единичных векторов по осям x , y , z пропорциональны частным производным:

$$\frac{\partial x}{\partial \vartheta}, \frac{\partial y}{\partial \vartheta}, \frac{\partial z}{\partial \vartheta}, \text{ соответственно } \frac{\partial x}{\partial \varphi}, \frac{\partial y}{\partial \varphi}, \frac{\partial z}{\partial \varphi}.$$

Взяв, как в (27), ось x в качестве полярной оси ($x = r \cos \vartheta$ и т. д.), имеем, таким образом,

$$\left. \begin{aligned} e_\theta &= -\sin \vartheta, \quad \cos \vartheta \cos \varphi, \quad \cos \vartheta \sin \varphi, \\ e_\varphi &= 0, \quad -\sin \varphi, \quad \cos \varphi \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

и по (28):

$$\left. \begin{aligned} M_\theta &= -M_x \sin \vartheta + M_y \cos \vartheta \cos \varphi + M_z \cos \vartheta \sin \varphi, \\ M_\varphi &= -M_y \sin \varphi + M_z \cos \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (30a)$$

В ближайших параграфах мы получим из вероятности элементарного процесса, *интегрируя по всем* α , β при постоянном направлении наблюдения ϑ , φ , *интегральную вероятность излучения фотона*. Выполнив это для каждого отдельного ν (для каждого значения уменьшения скорости $v_1 \rightarrow v_2$), получим в фиксированном направлении наблюдения сплошной рентгеновский спектр. С другой стороны, несколько позже, проинтегрировав вероятность (29a) по всем ϑ , φ при фиксированном направлении движения заторможенного электрона α , β , мы рассчитаем полную вероятность испускания электрона в направлении α , β . Тем самым будет найдено угловое распределение заторможенных электронов, или, говоря иначе, «дифференциальное поперечное сечение процесса торможения». Поскольку мы здесь варьируем также уменьшение скорости $v_1 \rightarrow v_2$, то получаем для каждого направления испускания α , β спектр электронов по скоростям.

В заключение рассмотрим особенно характерный случай $v_2 \rightarrow 0$, который соответствует коротковолновой границе сплошного рентгеновского спектра $\lambda = \lambda_{\text{мин}}$, $\nu = \nu_{\text{макс}}$ по уравнению (2). Если $v_2 \rightarrow 0$, то $k_2 \rightarrow 0$, $|n_2| \rightarrow \infty$, $x \rightarrow 0$, но так, что $n_2 x$ [ср. (6) и (16в)] приближается к пределу:

$$-n_2 x = 4 \frac{Z}{ik_1 a} \sin^2 \frac{\alpha}{2} = 4n_1 \sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

¹⁾ В работе Крамерса [Phil. Mag. 46, 836 (1923), § 4] дано более подробное доказательство с помощью дираковской теории излучения.

Этот предел будем обозначать через ρ , кроме того, вместо n_1 будем впредь писать n :

$$\rho = 4n \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (31)$$

Очевидно, мы имеем здесь дело с переходом, данным в гл. II, стр. 77, от невырожденной гипергеометрической функции к вырожденной, который там был описан уравнением (21):

$$\beta \rightarrow \infty, \quad x \rightarrow 0, \quad \beta x \rightarrow \rho \quad (32)$$

и соответственно в наших теперешних обозначениях

$$-n_2 \rightarrow \infty, \quad x \rightarrow 0, \quad -n_2 x \rightarrow \rho. \quad (32a)$$

Следовательно, по (II. 2.24)

$$F(-n_1, -n_2, 1, x) \rightarrow F(-n, 1, \rho) = L_n(\rho),$$

где $L_n(\rho)$ — функция Лагерра, которая уже была в уравнении (4).

Чтобы переписать (26) в новых обозначениях, вынесем n_2 из фигурных скобок и, объединив его с $k_1 k_2$ в C , получим $n k_1^2$; кроме того, заметим, что так как $n_2 x \rightarrow -\rho$, то

$$\frac{1}{n_2} \frac{dF}{dx} \rightarrow -\frac{dL}{d\rho} = -L'$$

и

$$\left(1 \pm \frac{k_2}{k_1}\right)^{n_1+n_2} \sim \left(1 \pm \frac{n_1}{n_2}\right)^{n_2} \rightarrow e^{\pm n},$$

$$(1-x)^{-n_1-n_2-1} = \left(1 + \frac{\rho}{n_2}\right)^{-n_2} \rightarrow e^{-\rho}.$$

Отсюда следует по (26) и (31):

$$M = -\frac{16\pi n}{k_1^4} \left[\frac{k_1}{k_2} (L - L') + \frac{k_2}{k_1} L' \right] e^{2n \cos \alpha - i\pi n}. \quad (33)$$

Мы видим, что хотя электрон заторможен до полной остановки ($v_2 = 0$, $k_2 = 0$), M всё-таки существенно зависит от направления вылетающего (с нулевой скоростью) электрона.

Для отдельных компонент из (33) получается:

$$\left. \begin{aligned} M_x &= -\frac{16\pi n}{k_1^4} \left(L - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} L' \right) e^{2n \cos \alpha - i\pi n}, \\ M_y \} &= -\frac{16\pi n}{k_1^4} \left\{ \begin{array}{l} \cos \beta \\ \sin \beta \end{array} \right\} \sin \alpha L' e^{2n \cos \alpha - i\pi n}. \end{aligned} \right\} \quad (33a)$$

Эти последние формулы, которые, конечно, также непосредственно следуют из (27) при предельном переходе, разъяснят нам в следующих параграфах спорные вопросы интенсивности и поляризации рентгеновского спектра у коротковолновой границы.

§ 3. ИНТЕНСИВНОСТЬ И ПОЛЯРИЗАЦИЯ В СПЛОШНОМ РЕНТГЕНОВСКОМ СПЕКТРЕ

На стр. 433 мы наметили произвести интегрирование по α , β при фиксированных ϑ , φ , чтобы вычислить излучение от всех элементарных процессов α , β в направлении ϑ , φ . Так как элементарные процессы представляют независимые один от другого акты, то, следовательно, их поля излучения

не когерентны, и мы должны суммировать вероятности $|M|^2$, а не амплитуды вероятности M ; поэтому образуем:

$$\int d\omega |M_\theta|^2 \text{ и } \int d\omega |M_\varphi|^2, \quad \int d\omega \dots = \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \dots \quad (1)$$

При этом заведомо множитель (о котором до сих пор не говорилось), нормирующий собственную функцию и присоединённый к $|M|^2$, не зависит от α , β , или, выражаясь иначе, вылет электрона по различным направлениям α , β при равных телесных углах $d\omega$ а priori равновероятен.

Мы начнём с коротковолновой границы $\nu_2 = 0$, $\nu = \nu_0$ и исследуем отдельно оба направления поляризации по возрастающим θ и φ (ср. стр. 433). Заметим, что первый и второй виды поляризации означают соответственно, что E колеблется в плоскости, проходящей через направление падения катодного луча и направление наблюдения, или в плоскости, перпендикулярной к этой плоскости.

Согласно (2.33), (2.28) и (2.30) получаем:

$$\left. \begin{aligned} |M_\theta|^2 &= C^2 \left[-\sin \theta (L - L') + [-\sin \theta \cos \alpha + \cos \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)] L' \right]^2, \\ |M_\varphi|^2 &= C^2 \left[-\sin \alpha \sin \varphi - \beta L' \right]^2, \quad C = \frac{16\pi |n|}{k_1^4} e^{-i\pi n}. \end{aligned} \right\} \quad (1a)$$

При интегрировании по $d\omega$ получаем, имея в виду, что $\int \cos(\varphi - \beta) d\beta = 0$,

$$\int \frac{\cos^2}{\sin^2}(\varphi - \beta) d\beta = \pi, \quad \int d\beta = 2\pi:$$

$$\left. \begin{aligned} \int |M_\theta|^2 d\omega &= 2\pi C^2 \sin^2 \theta \int \sin \alpha d\alpha \left[L - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} L' \right]^2 + \\ &\quad + \pi C^2 \cos^2 \theta \int \sin^2 \alpha d\alpha |L'|^2, \\ \int |M_\varphi|^2 d\omega &= \pi C^2 \int \sin^2 \alpha d\alpha |L'|^2. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Сравнение с (2.33a) показывает, что

$$\left. \begin{aligned} \int |M_\theta|^2 d\omega &= \sin^2 \theta \int |M_\omega|^2 d\omega + \cos^2 \theta \int |M_n|^2 d\omega, \\ \int |M_\varphi|^2 d\omega &= \int |M_n|^2 d\omega, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где M_n — компонента M , перпендикулярная к x , например M_y или M_z .

Можно было бы ожидать из элементарных соображений (прямолинейное торможение по оси x ; ср. стр. 422), что тормозное излучение обусловлено только матричным элементом M_x и что $M_n = 0$. Этому соответствовало бы по (3)

$$\int |M_\theta|^2 d\omega = \sin^2 \theta \int |M_\omega|^2 d\omega, \quad |M_\varphi|^2 = 0,$$

и, следовательно, одно состояние поляризации, как в случае герцевского диполя. В действительности это не так, потому что M также зависит от направления вылетающих (со скоростью нуль) электронов. Следовательно, поляризация не может быть полной.

Назовём степенью деполаризации величину

$$D = \frac{\int |M_n|^2 d\omega}{\int |M_\theta|^2 d\omega}. \quad (4)$$

Тогда имеем по (3):

$$\frac{\int |M_\varphi|^2 d\omega}{\int |M_\theta|^2 d\omega} = \frac{D}{\sin^2 \theta + \cos^2 \theta D}. \quad (4a)$$

Обратимся к рассмотрению D . По (4) и (2.33a)

$$D = \frac{J_2}{2J_1}, \quad (5)$$

где

$$J_1 = \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha |L - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} L'|^2, \quad J_2 = \int_0^\pi \sin^3 \alpha d\alpha |L'|^2. \quad (5a)$$

Вычисление этого интеграла удастся произвести, только разлагая его в ряд по возрастающим степеням n , т. е. практически лишь для малых n . Малые значения n означают по (2.6) *жесткое излучение*, а именно (мы используем второе приведенное там выражение для n):

$$\beta_1 > \alpha Z.$$

Так как, с другой стороны, должно быть $\beta_1 < 1$, чтобы был справедлив наш нерелятивистский расчёт, мы приходим к двойному неравенству, удовлетворяющему лишь для лёгких атомов:

$$\alpha Z < \beta_1 < 1. \quad (6)$$

К счастью, оно в некоторой степени удовлетворяется для разбираемого ниже случая Al, например, при $\beta_1 = \frac{1}{3}$, $V = 30$ кВ n имеет значение 1/3,5.

Разложение L в степенной ряд для специального случая вырожденного гипергеометрического ряда в соответствии с уравнением (21) (стр. 104) даёт:

$$L = 1 - \binom{n}{1} \rho + \binom{n}{2} \frac{\rho^2}{2} - \dots \quad L' = - \left[\binom{n}{1} - \binom{n}{2} \rho + \binom{n}{3} \frac{\rho^2}{2} - \dots \right],$$

следовательно, для $\rho = 4n \sin^2 \frac{\alpha}{2}$ [уравнение (2.31)]

$$L = 1 - 4n^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} + 4n^2(n-1) \sin^4 \frac{\alpha}{2} \dots,$$

$$L' = -n \left[1 - 2n(n-1) \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \frac{4}{3} n^2(n-1)(n-2) \sin^4 \frac{\alpha}{2} + \dots \right].$$

Отсюда, ограничиваясь членами до n^4 :

$$|L'|^2 = |n|^2 \left\{ 1 - 4n^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \frac{4}{3} n^2 \sin^4 \frac{\alpha}{2} + \dots \right\},$$

$$\left| L - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} L' \right|^2 = 1 - 8n^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} + 4n^2(1 - 5n^2) \sin^4 \frac{\alpha}{2} + \dots$$

и после интегрирования

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= 2 \left(1 + \frac{8}{3} |n|^2 - \frac{20}{3} |n|^4 + \dots \right), \\ J_2 &= \frac{4}{3} |n|^2 \left(1 + \frac{8}{5} |n|^2 + \dots \right), \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

следовательно, по (5)

$$D = \frac{J_2}{2J_1} = \frac{|n|^2}{3} \frac{1 + \frac{8}{5} |n|^2 + \dots}{1 + \frac{8}{3} |n|^2 + \dots}. \quad (8)$$

На рис. 30 нанесено D как функция $|n|$. Сплошная линия представляет рассмотренное в § 8 [уравнение (7)] приближение для больших $|n|$. Для малых $|n|$ поляризация почти полная; для больших $|n|$ степень деполяризации приближается к пределу, равному $1/4$.

Обратимся к *интенсивности* излучения и сначала напишем её по (2) для произвольного направления наблюдения ϑ , φ :

$$\int (|M_\vartheta|^2 + |M_\varphi|^2) d\omega = 2\pi |C|^2 \sin^2 \vartheta J_1 + \pi |C|^2 (1 + \cos^2 \vartheta) J_2, \quad (9)$$

или, принимая во внимание (7),

$$4\pi |C|^2 \left\{ \left(1 + \frac{7}{3} |n|^2 \right) \sin^2 \vartheta + \frac{2}{3} |n|^2 + \dots \right\}. \quad (9a)$$

Мы заключаем отсюда: для жёсткого излучения (малые $|n|$) отношение интенсивности при продольном направлении наблюдения ($\vartheta = 0$) к интенсивности при поперечном направлении наблюдения ($\vartheta = \pi/2$) мало (порядка $|n|^2:1$). Это связано, повидимому, с тем, что рассмотренной почти полной поляризацией жёсткого излучения и согласуется с обычными представлениями прямолинейного торможения (преобладание M_ϑ над M_n). Это, однако, находится в противоречии с впервые установленным Рентгеном распределением интенсивности от *массивного антикатада*. Противоречие разъясняется следующим образом: мы рассматриваем торможение на *отдельном атоме* или практически на очень тонкой плёнке, а это нельзя непосредственно сравнивать с действием массивного антикатада, в котором электроны, проникнув внутрь него, могут быть рассеяны по всем направлениям.

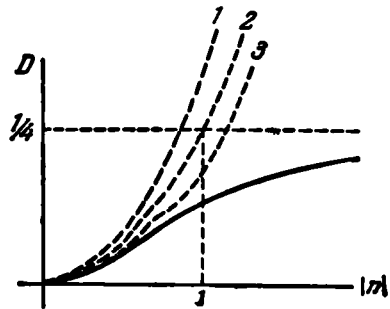


Рис. 30. Деполяризация на коротковолновой границе в зависимости от жёсткости излучения (возрастающая жёсткость соответствует убывающим $|n|$). Пунктирные кривые изображают: 1 — параболу $|n|^2/3$, 2 — приближение уравнения (8), 3 — приближение, получающееся при сохранении членов с $|n|^4$.

В (9a) отсутствуют ещё нормирующие множители, которые мы должны теперь вычислить.

а) В матричном элементе (2.7) надо добавить нормирующие множители N_1 и N_2 для собственных функций ψ_1 и ψ_2 и, следовательно, присоединить N_1^2 и N_2^2 к множителю, стоящему перед выражением для интенсивности. N_1 наглядным способом получим в в). Для определения N_2 обратимся к (II. 9.32)

с $|n_2| \rightarrow \infty$:

$$N_2^2 = \frac{|n_2|}{(2\pi)^2}. \quad (10a)$$

б) Эта нормировка (ср. добавление 8) относится к *пространству волновых чисел*. Такая нормировка отвечает тому, что единичному объёму в пространстве волновых чисел k_2 приписывают статистический вес единица, а сферическому слою радиуса k_2 и толщиной $|dk_2|$ статистический вес

$$4\pi k_2^2 |dk_2|. \quad (10b_1)$$

При подсчёте состояний ψ_2 в (1) отдельные состояния, обозначенные через k_2, α, β , имели вес $d\omega = \sin \alpha d\alpha d\beta$, следовательно, вес всего сферического слоя равен 4π . По сравнению с (10b₁) в этом выражении не хватает множителя

$$k_2^2 |dk_2|. \quad (10b_2)$$

Перейдём от введённого здесь пространства волновых чисел к пространству частот излучения. По (2.2) при фиксированном k_1

$$h d\nu = \frac{\hbar^2}{m} k_2 |dk_2|, \text{ следовательно, } k_2^2 |dk_2| = (2\pi)^2 k_2 \frac{m}{h} d\nu. \quad (10b_3)$$

Перемножая (10b₂) и (10b₁) и принимая во внимание (10b₃) и $|n_2| k_2 = Z/a$, получаем:

$$N_2^2 k_2^2 dk_2 = \frac{m}{h} \frac{Z}{a} d\nu. \quad (10b_4)$$

Это и есть множитель, добавляемый благодаря нормировке *конечного состояния* к нашему выражению (9a).

в) С другой стороны, целесообразно пронормировать начальное состояние так, чтобы на больших расстояниях от ядра плотность потока соответствовала единице. Тогда на каждый электрон приходится объём с единичным поперечным сечением и протяжённостью по оси x $v_1 = \frac{k_1 \hbar}{m}$. Величина, обратная величине этого объёма, есть

$$\frac{2\pi}{k_1} \frac{m}{h}. \quad (10b_5)$$

Так как плоской волне $e^{i(k,r)}$ отвечает плотность, равная одному электрону на единичный объём, то, для того чтобы пронормировать на единичный поток, мы должны умножить $e^{i(k,r)}$ на (10b₅).

Кроме этого появляется ещё второй множитель. Квадрат модуля $|\psi_1|^2$ нашей волновой функции, определённой в (2.4), отличается на бесконечности от квадрата модуля (равного единице) волновой функции, имеющей вид плоской волны $\exp i(kr)$ по (II. 9.32), множителем

$$\frac{1 - e^{-2\pi |n_1|}}{2\pi |n_1|}. \quad (10b_6)$$

На этот множитель мы должны разделить $|\psi_1|^2$, чтобы асимптотическое поведение нашего начального состояния было бы таким же, как поведение состояния, представленного плоской волной. Соответственно этому мы должны (10b₅) также разделить на (10b₆), чтобы пронормировать наше начальное состояние на единичную плотность потока. По сказанному мы должны принять:

$$N_1^2 = \frac{2\pi}{k_1} \frac{m}{h} \frac{2\pi |n_1|}{1 - e^{-2\pi |n_1|}} = (2\pi)^2 \frac{m}{h} \frac{Z}{a} \frac{k_1^{-2}}{1 - e^{-2\pi |n_1|}}. \quad (10b_7)$$

г) Наконец, добавим ещё фотонный множитель, а именно [ср. примечание на стр. 53, уравнение (1)]:

$$\frac{e^2}{4\pi c^3 r^2} 2\omega^4, \quad (10\Gamma_1)$$

причём в отношении множителя 2 при ω^4 отсылаем к уравнениям (6), (6а) на стр. 54, 55. Подставляя ω из (2.2) (с $\omega = 2\pi\nu$, $k_2 = 0$), получаем вместо (10Г₁):

$$\frac{2e^2}{4\pi c^3 r^2} \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^4 k_1^8. \quad (10\Gamma_2)$$

Произведение добавленных множителей (10Г₁), (10Г₂) (если опять вместо n_1 писать n) равно

$$\frac{e^2}{2c^3 r^2} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \left(\frac{Z}{a}\right)^2 (4\pi)^{-3} \frac{k_1^6 d\nu}{1 - e^{-2\pi|n|}}. \quad (11)$$

Умножая это выражение на (9а) и подставляя C из (1а), получаем:

$$J_\nu d\nu = A \{ \} d\nu, \quad A = \frac{8e^2}{c^3 r^2} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \frac{|n|^4}{e^{2\pi|n|} - 1}. \quad (12)$$

J_ν — интенсивность частоты ν на интервал $d\nu$ рентгеновского спектра на его коротковолновой границе. Фигурные скобки имеют то же самое значение, что и в (9а), и при малом $|n|$ и поперечном наблюдении ($\theta = \frac{\pi}{2}$) равны единице. Из (12) видно, что интенсивность спектра на коротковолновой границе имеет значение, отличное от нуля. Она падает скачком от конечного значения до нуля. Производная этого выражения как раз и является точным значением нашего матричного элемента. Для получения дальнейших результатов также будут сделаны приближённые расчёты (ср. § 7).

Обратимся теперь к общему рассмотрению сплошного спектра и положим k_2 не равным нулю. Тогда представление (2.33а) для M_x , M_n примет вид (2.27). В результате этого определение (5а) интегралов J_1 , J_2 изменится следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= \int_0^\pi \frac{\sin \alpha d\alpha}{(1-x)^2} |(n_2 - n_1 \cos \alpha) F + (1 - \cos \alpha)(1-x) F'|^2, \\ J_2 &= \int_0^\pi \frac{\sin^3 \alpha d\alpha}{(1-x)^2} |n_1 F + (1-x) F'|^2. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

После этого общие формулы (5) и (9) для поляризации и интенсивности остаются справедливыми.

При вычислении (13) возьмём $|n_1| \ll 1$ и первое грубое приближение

$$F = 1, \quad F' = 0. \quad (13а)$$

Расчёт для $|n_2| \gg 1$ (вблизи коротковолновой границы $x \ll 1$) основывается на обычном выражении F [см., например, уравнение (II. 2.20)]. Для других значений n_2 , особенно для значений, близких к длинноволновой границе $n_2 \sim n_1$, можно использовать трансформированный F -ряд, который сходится для всех встречающихся в рассмотрении значений x и стремится к единице при $n_1 \rightarrow 0$.

Преобразуем интегралы по α , сделав замену:

$$x = x_0 \sin^2 \frac{\alpha}{2}, \quad x_0 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 - k_2)^2} = \frac{4n_1 n_2}{(n_2 - n_1)^2}. \quad (13б)$$

Таким образом, имеем:

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= \frac{8 |n_1|^2}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{dx}{(1-x)^2} \left(x - \frac{2n_2}{n_2 - n_1}\right)^2, \\ J_2 &= \frac{8 |n_1|^2}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{dx}{(1-x)^2} x(x_0 - x). \end{aligned} \right\} \quad (13a)$$

Вычисление становится элементарным после замены переменных $y = 1 - x$. Затем, переходя обратно от n_1, n_2 к k_1, k_2 , получаем окончательный результат:

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{(k_1 - k_2)^4}{k_1^4 k_2^2} \left\{ \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \ln \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} + 1 \right\}, \\ J_2 &= \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{(k_1 - k_2)^4}{k_1^4 k_2^2} \left\{ \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \ln \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} - 1 \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Отсюда следует, что степень деполяризации согласно (5) равна

$$D = \frac{J_2}{2J_1} = \frac{\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \ln \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} - 1}{2 \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \ln \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} + 1 \right)}. \quad (15)$$

В предельном случае $k_2 \rightarrow 0$, $\nu = \nu_g$ получается, если логарифмы в числителе и знаменателе разложить по степеням k_2/k_1 , $D = 0$ [как это и должно быть по (8) при достаточно малых $|n_1|$]. Вблизи коротковолновой границы D медленно возрастает в сторону длинных волн (ср. рис. 31) и соответственно поляризация уменьшается; наоборот, D резко уменьшается (ср. рис. 32) вблизи длинноволновой границы.

Пунктирная линия на рис. 31 показывает спектральный ход D для очень мягкого излучения в соответствии с уравнением (8.7а).

В том же грубом приближении рассчитаем теперь спектральное распределение интенсивности. При поперечном наблюдении ($M_p = M_w$, $M_p = M_n$), согласно (9), оно будет определяться выражением

$$\int (|M_w|^2 + |M_n|^2) d\omega = 2\pi |C|^2 \left(J_1 + \frac{1}{2} J_2 \right) \quad (16)$$

со значением C из (2.26а). Сюда надо ещё присоединить множители, названные в пунктах а) — г), но с изменениями, так как $k_2 \neq 0$, а именно:

$$\left. \begin{aligned} \text{вместо (10a)} \quad N_2^2 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{|n_2|}{1 - e^{-2\pi |n_1|}}, \\ \text{вместо (10б)} \quad N_2^2 k_1^2 dk_2 &= \frac{m}{h} \frac{Z}{a} \frac{d\nu}{1 - e^{-2\pi |n_1|}}, \\ \text{вместо (10г)} \quad \frac{2e^2}{4\pi c^3 r^2} \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^4 (k_1^2 - k_2^2)^4, \\ \text{вместо (11)} \quad \frac{e^2}{2c^3 r^2} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{(k_1^2 - k_2^2)^4}{(4\pi)^3 k_1^2} \frac{d\nu}{(1 - e^{-2\pi |n_1|})(1 - e^{-2\pi |n_2|})}. \end{aligned} \right\} \quad (16a)$$

Перемножая это последнее выражение с (16) и подставляя выражение (14), получаем:

$$J, d\nu = \frac{A}{1 - e^{-2\pi |n_2|}} \left\{ \frac{3k_1^2 - k_2^2}{8k_1 k_2} \ln \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} + \frac{1}{4} \right\} d\nu, \quad (17)$$

где A имеет то же самое значение, что и в (12). Рис. 32 изображает J , в зависимости от ν . Ход кривой почти горизонтальный, если отвлечься от самых малых ν (очень мягкая часть спектра, которая практически не интересна из-за поглощения в стенках трубки). На рис. 32 из полной интенсивности J , выделены штриховкой части J_1 и $1/2 J_2$. Этим ещё раз поясняется происхождение поляризации. Доля излучения, поляризованная параллельно направлению падения, происходит от J_1 , деполаризация — от J_2 . Последняя

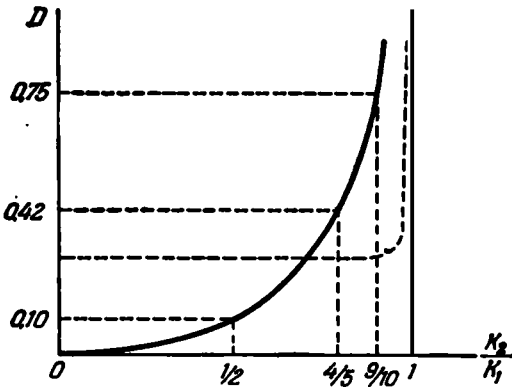


Рис. 31. Ход деполаризации в сплошном спектре. Слева — коротковолновая, справа — длинноволновая границы. Сплошная кривая соответствует жёсткому падающему излучению с $|n_1| = 1/2$, пунктирная кривая — предельный случай очень мягкого излучения.

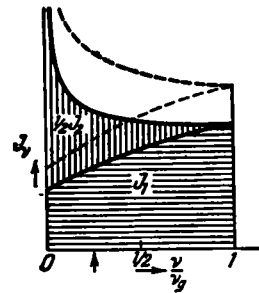


Рис. 32. Интенсивность в сплошном спектре, разделённая на свои поляризованные составные части, при большой жёсткости падающих катодных лучей. Пунктирные кривые дают поправку для промежуточной жёсткости, напряжение 30 кВ.

возрастает с удалением от коротковолновой границы. Точка, где интенсивности становятся равными, отмечена на рисунке стрелкой. В этой точке $D = 1$, следовательно, по уравнению (19) $P = 0$. При дальнейшем приближении к длинноволновой границе P стало бы отрицательным, следовательно, поляризация становится перпендикулярной к направлению падения.

Эти кривые справедливы прежде всего лишь для $|n_1| \ll 1$. Для мягкого излучения добавляется поправочный множитель, при учёте которого для $|n_1| = 1/2$ получается кривая, изображённая на рисунке пунктирной линией. В работе Эльверта, цитированной на стр. 429, этот поправочный множитель найден для длинноволновой границы с помощью пересчёта $J_1 + J_2$ по методу § 5. Для нашего грубого приближения (14) этот поправочный множитель равен

$$\left(\frac{\text{sh } |n_1| \pi}{|n_1| \pi} \right)^2, \quad (18)$$

и в данном приближении его можно включить по отдельности в J_1 и J_2 . Разложение этого множителя даёт:

$$1 + \frac{\pi^2}{3} |n_1|^2 + \dots \quad (18a)$$

С другой стороны, наши строгие формулы (7) в случае коротковолновой границы для $J_1 + J_2$ дают:

$$2\left(1 + \frac{10}{3}|\pi|^2 + \dots\right), \quad (18б)$$

где скобки почти точно совпадают с (18а). Поэтому мы имеем право использовать этот множитель для всего спектра и отдельно для J_1 , J_2 и поэтому для не очень жёсткого излучения мы должны исправить, как было указано, кривые на рис. 32.

Почти горизонтальный ход интенсивности и её крутое падение на коротковолновой границе качественно подтверждаются наблюдениями (см. работы, цитированные на стр. 421). Бесконечное возрастание на длинноволновой границе дало повод к интересным, хотя и не имеющим практического значения исследованиям¹⁾, на которые здесь мы можем только сослаться.



Рис. 33. Поляризация P в шкале λ . Результаты наблюдений Куленкампа отмечены кружками.

Мы должны ещё коротко остановиться на экспериментальных доказательствах поляризации излучения.

Связь степени поляризации P и деполяризации D такая же, как и в обычной оптике:

$$P = \frac{1-D}{1+D}. \quad (19)$$

Так как при переходе от очень жёстких лучей к лучам средней жёсткости, согласно сказанному выше, поправочный множитель не оказывает существенного влияния на D , а поэтому также и на P , мы можем получить графическое изображение для P простой перестройкой кривых рис. 31. Полученная таким образом зависимость P от длины волн дана на рис. 33 для окрестности коротковолновой границы. Здесь приведено также сравнение с опытами Куленкампа²⁾, выполненными с тонкой фольгой Al и напряжением 30 кВ. Точки, полученные на опыте, лежат заметно ниже теоретической кривой. Причина этого отклонения ещё не ясна. Поляризационные измерения³⁾ также не дают полного согласия с теорией.

§ 4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО НАПРАВЛЕНИЯМ ПРИ ТОРМОЖЕНИИ

В то время как в предыдущих параграфах мы вычисляли полную вероятность излучения фотонов, интегрируя дифференциальную вероятность по всем углам α , β , теперь мы рассчитаем полную вероятность излучения электронов, интегрируя ту же самую дифференциальную вероятность по всем углам θ , φ . Образуем при фиксированных α , β :

$$S = \int (|M_\theta|^2 + |M_\varphi|^2) d\omega_{\theta\varphi}, \quad d\omega_{\theta\varphi} = \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (1)$$

Выражая S как функцию α , β , получаем распределение заторможенных электронов по направлениям. Согласно (2.30а) имеем [ср. также (2.27)]:

$$\left. \begin{aligned} M_\theta &= -M_x \sin \theta + \sqrt{M_y^2 + M_z^2} \cos \theta \cos(\varphi - \beta), \\ M_\varphi &= -\sqrt{M_y^2 + M_z^2} \sin(\varphi - \beta). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

¹⁾ F. Bloch a. A. Nordstiek, Phys. Rev. 52, 54 (1937); A. Nordstiek, там же 52, 59 (1937); W. Pauli a. M. Fierz, Nuovo Cimento, март 1938, 187 (Atti des. Galvani-Congresses).

²⁾ H. Kulenkampff, Phys. Zs. 60, 514 (1929),

³⁾ P. S. Pison, Phys. Rev. 4, 273 (1936).

Отсюда следует:

$$|M_\theta|^2 + |M_\varphi|^2 = |M_\omega|^2 \sin^2 \theta + |M_y^2 + M_z^2| (\cos^2 \theta \cos^2 (\varphi - \beta) + \sin^2 (\varphi - \beta) + \dots \quad (2a)$$

Невыписанный явно член содержит множитель $\cos(\varphi - \beta)$ и поэтому пропадает при интегрировании в (1). Из (2a) теперь прямо вытекает:

$$S = \frac{8\pi}{3} (|M_\omega|^2 + |M_y^2 + M_z^2|). \quad (3)$$

Следовательно, S зависит по существу лишь от суммы квадратов матричных элементов:

$$M^2 = |M_\omega|^2 + |M_y^2 + M_z^2| = |M_\omega|^2 + |M_y|^2 + |M_z|^2. \quad (4)$$

Если ограничиться жёстким излучением и использовать (3.13a), из (2.27) следует:

$$M^2 = |C|^2 \frac{|n_1|^2 + |n_2|^2 - 2|n_1 n_2| \cos \alpha}{(1-x)^2}. \quad (5)$$

Здесь числитель отличается от знаменателя множителем $1 - x$. Действительно, в силу (3.13)

$$1 - x = \frac{|n_1|^2 + |n_2|^2 - 2|n_1 n_2| \cos \alpha}{|n_1 - n_2|^2}.$$

Поэтому вместо (5) можно написать, если одновременно перейти от n_1, n_2 к k_1, k_2 :

$$M^2 = |C|^2 |n_1 - n_2|^2 \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 \cos \alpha}. \quad (6)$$

Изобразим это уравнение на полярной диаграмме, рассматривая величину $M^2/|C|^2|n_1 - n_2|^2$ как радиус-вектор, соответствующий углу α . При этом получается эллипс. Сравним его с известным уравнением эллипса в полярных координатах:

$$\frac{1}{r} = \frac{1 - \varepsilon \cos \alpha}{a(1 - \varepsilon^2)}. \quad (6a)$$

Из (6) и (6a) получается, что эксцентриситет, большая и малая оси соответственно равны

$$\varepsilon = \frac{2k_1 k_2}{k_1^2 + k_2^2}, \quad a = \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2 - k_2^2}, \quad b = 1. \quad (7)$$

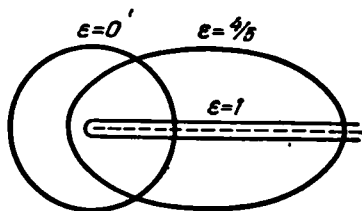


Рис. 34. Угловое распределение вылетающих электронов при заданном уменьшении скорости k_2/k_1 .

При $k_2/k_1 = 0$ получаем окружность (коротковолновая граница тормозного спектра), при $k_2/k_1 \rightarrow 1$ эллипс вырождается в прямую, при $k_2/k_1 = 1/2$ получается эллипс $\varepsilon = 4/5$.

Эти три случая приведены на рис. 34. На последнем дано угловое распределение излучённых электронов при определённом k_2/k_1 (определённое уменьшение скорости). Фиксируя угол α и варьируя отношение k_2/k_1 , получаем для каждого α спектр скоростей электронов. Повидимому, не исключено, что этот спектр можно будет наблюдать с помощью магнитного отклонения и подходящего счётчика.

Когда интегрируют по спектру, т. е. интересуются полным числом электронов, испущенных в данном направлении, то наталкиваются на трудность,

вызываемую расходимостью, которая возникает на длинноволновой границе $k_2 = k_1$ и, следовательно, отвечает бесконечно мало заторможенным электронам. Этим вопросом занимались в работах, цитированных на стр. 442.

Чтобы привести кривые рис. 34 к абсолютным мерам, надо учесть ещё множитель $|C|^2 |n_2 - n_1|^2$ в уравнении (6), а также нормировочный множитель из (3.11) или (3.16а).

Вопросы, изложенные в этих параграфах, полностью разработаны в диссертации Шерцера, цитированной на стр. 425. Приближённая формула (6) впервые выведена Моттом¹⁾.

§ 5. ПОЛНАЯ ПОТЕРЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Расчёт излучения для данного направления θ , φ , сделанный в § 3, был произведён лишь благодаря более или менее грубым приближениям. Мы хотим теперь показать, что существует некоторая величина, которая может быть вычислена без пренебрежений и которая имеет очень простой физический смысл. Назовём эту величину «*полной потерей излучения*» и определим её следующим образом.

В § 3 мы рассмотрели величину

$$J = \int (M_\theta^2 + M_\varphi^2) d\omega_{\theta\varphi},$$

и в § 4

$$S = \int (M_\theta^2 + M_\varphi^2) d\omega_{\theta\varphi}.$$

Теперь рассмотрим величину

$$W = \int \int (M_\theta^2 + M_\varphi^2) d\omega_{\alpha\beta} d\omega_{\theta\varphi} = \int J d\omega_{\theta\varphi} = \int S d\omega_{\alpha\beta}. \quad (1)$$

Она представляет с точностью до множителя потерю энергии посредством излучения, которую испытывает падающий электрон при всех возможных актах торможения, происходящих с заданным уменьшением скорости $v_1 \rightarrow v_2$, но с любыми углами вылета α , β .

Подставляя в последний член (1) выражение (4.3), получим:

$$W = \frac{8\pi}{3} \int M^2 d\omega_{\alpha\beta} \begin{cases} M^2 = |M_x|^2 + |M_y|^2 + |M_z|^2, \\ d\omega_{\alpha\beta} = \sin \alpha d\alpha d\beta. \end{cases} \quad (2)$$

Мы возвращаемся к уравнению (3.16), в котором, как мы знаем, J_1 происходит от $|M_x|^2$, $\frac{1}{2} J_2$ — от $|M_y|^2$, следовательно, от $|M_y|^2$ или $|M_z|^2$. Вместо этого теперь дело идёт о $|M_y|^2$ и $|M_z|^2$. Следовательно, для вычисления интеграла (2) мы должны лишь в (3.16) заменить $\frac{1}{2} J_2$ через J_2 . Благодаря этому получаем:

$$\int M^2 d\omega_{\alpha\beta} = 2\pi |C|^2 (J_1 + J_2). \quad (3)$$

Здесь, согласно (3.13),

$$J_1 + J_2 = \int_0^\pi \frac{\sin \alpha d\alpha}{(1-x)^2} \left\{ (n_2 - n_1 \cos \alpha) F + (1 - \cos \alpha)(1-x) F'^2 + \right. \\ \left. + \sin^2 \alpha |n_1 F + (1-x) F'|^2 \right\}. \quad (4)$$

¹⁾ N. F. Mott, Proc. Camb. Phil. Soc. 27, 255 (1931); ср. также Мотт и Мессе, Теория атомных столкновений.

Обозначив

$$F^* = G, \quad \frac{d}{dx} F^* = F'^* = G', \quad (5)$$

легко получаем:

$$\begin{aligned} |(n_2 - n_1 \cos \alpha)F + (1 - \cos \alpha)(1 - x)F'|^2 = \\ = aFG + b(FG' - GF') + cF'G', \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\sin^2 \alpha |n_1 F + (1 - x)F'|^2 = a_1 FG + b_1 (FG' - GF') + c_1 F'G'. \quad (6b)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} a &= -(n_2 - n_1 \cos \alpha)^2, & a_1 &= -\sin^2 \alpha n_1^2, \\ b &= 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} (n_2 - n_1 \cos \alpha)(1 - x), & b_1 &= \sin^2 \alpha n_1 (1 - x), \\ c &= 4 \sin^4 \frac{\alpha}{2} (1 - x)^2, & c_1 &= \sin^2 \alpha (1 - x)^2. \end{aligned}$$

Отсюда, пересчитывая всё на угол $\frac{\alpha}{2}$, получаем:

$$a + a_1 = -(n_2 - n_1)^2 - 4n_1 n_2 \sin^2 \frac{\alpha}{2},$$

$$b + b_1 = 2(n_1 + n_2) \sin^2 \frac{\alpha}{2} (1 - x),$$

$$c + c_1 = 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} (1 - x)^2,$$

или, переходя к x с помощью (3.136):

$$a + a_1 = -(n_2 - n_1)^2 (1 - x),$$

$$b + b_1 = -\frac{(n_2 - n_1)^2 n_1 + n_2}{n_1 n_2} x (1 - x),$$

$$c + c_1 = -\frac{(n_2 - n_1)^2}{n_1 n_2} x (1 - x)^2.$$

Сумма (6a) и (6b) записывается теперь в виде:

$$-\frac{(n_2 - n_1)^2}{n_1 n_2} (1 - x) \left\{ n_1 n_2 FG + \frac{n_1 + n_2}{2} x (FG' - GF') + x(1 - x)F'G' \right\}. \quad (7)$$

При подстановке в (4) получим, предварительно выразив $\sin \alpha d\alpha$ через dx :

$$\begin{aligned} J_1 + J_2 = \frac{(n_1 - n_2)^4}{2n_1^2 n_2^2} \left\{ n_1 n_2 \int FG \frac{dx}{1-x} + \frac{n_1 + n_2}{2} \int (FG' - GF') \frac{x dx}{1-x} + \right. \\ \left. + \int F'G' x dx \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Интегрирование производится от $x = 0$ до

$$x = x_0 = -\frac{4n_1 n_2}{(n_1 - n_2)^2}. \quad (8a)$$

Правую часть выражения (8) можно вычислить с помощью дифференциальных уравнений для функций F и G .

Согласно гл. II уравнение (2.18), называемое дифференциальным уравнением гипергеометрической функции, в общем виде записывается:

$$x(1-x)F'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x]F' - \alpha\beta F = 0. \quad (9)$$

Это даёт в нашем случае ($\alpha = -n_1$, $\beta = -n_2$, $\gamma = 1$):

$$x(1-x)F'' + [1 - (1 - n_1 - n_2)x]F' - n_1n_2F = 0 \quad (9a)$$

и для G ($\alpha = +n_1$, $\beta = +n_2$, $\gamma = 1$):

$$x(1-x)G'' + [1 - (1 + n_1 + n_2)x]G' - n_1n_2G = 0. \quad (9b)$$

Умножив (9a) на G , (9b) на F и сложив их, затем получим:

$$x(1-x)(FG'' + GF'') + (1-x)(FG' + GF') - (n_1 + n_2)x(FG' - GF') - 2n_1n_2FG = 0. \quad (10)$$

Поэтому напишем:

$$x(FG'' + GF'') + FG' + GF' = (n_1 + n_2)\frac{x}{1-x}(FG' - GF') + 2n_1n_2\frac{FG}{1-x}. \quad (10a)$$

С другой стороны, справедливо очевидное тождество:

$$x(FG'' + GF'') + GF' + GF' = \frac{d}{dx}x(FG' + GF') - 2xF'G'. \quad (10b)$$

Из сравнения правых частей (10a, б) теперь следует:

$$n_1n_2\frac{FG}{1-x} + \frac{n_1 + n_2}{2}\frac{x}{1-x}(FG' - GF') + xF'G' = \frac{1}{2}\frac{d}{dx}x(FG' + GF').$$

Если проинтегрируем это выражение от 0 до x_0 , то слева получим выражение в фигурных скобках из уравнения (8). Справа получается:

$$\frac{x_0}{2}(FG' + GF')_{x_0} = \frac{x_0}{2}\frac{d}{dx_0}|F(x_0)|^2.$$

Подстановка в (8) поэтому даёт:

$$J_1 + J_2 = \frac{(n_1 - n_2)^4}{4n_1^2n_2^2}x_0\frac{d}{dx_0}|F(x_0)|^2 = -\frac{(n_1 - n_2)^2}{n_1n_2}\frac{d}{dx_0}|F(x_0)|^2. \quad (11)$$

Если произведение n_1n_2 в F считать малой величиной и перейти от n_1, n_2 к k_1, k_2 , то это выражение полностью совпадает с суммой обоих выражений (3.14); тем самым проверяется наш прежний приближённый расчёт.

Одновременно с $J_1 + J_2$ замкнутой формулой, согласно (2) и (3), изображается и потеря излучения W . Если ещё присоединить нормировочные множители ¹⁾ из уравнения (3.16a), то эта формула примет вид:

$$W = \frac{e^2}{c^3}\left(\frac{h}{m}\right)^2\left(\frac{Z}{a}\right)^2\frac{d\nu}{(e^{2\pi|n_1|} - 1)(1 - e^{-2\pi|n_2|})}\frac{x_0}{k_1^2}\frac{d}{dx_0}|F(x_0)|^2. \quad (12)$$

Это уравнение с точки зрения метода матричных элементов является строго правильным для всего спектра и для всех энергий падающих и вылетающих электронов. Его простота и общность, повидимому, связаны с простым физическим смыслом W как полной потери излучения в противоположность сложным формулам, которые мы вынуждены были вывести приближённо в § 3 для интенсивности излучения J в произвольном направлении наблюдения θ, φ .

§ 6. ЗАПАЗДЫВАНИЕ И ОПЕРЕЖЕНИЕ

Для жёсткого излучения второй степенью приближения по сравнению с методом матричных элементов является метод вектор-потенциала (гл. I, § 8). Поле излучения рассчитывается по этому методу с помощью инте-

¹⁾ Множитель r^2 в знаменателе (3.16a) опускается, так как мы определяли и (1) W как излучение через сферу радиуса $r = 1$.

грала из уравнения (21) на стр. 59, в котором опущены некоторые множители:

$$E = \int j_{\perp} e^{-ix(r^n)} d\tau. \quad (1)$$

Здесь, как в (2.2), волновое число излучения равно

$$x = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{\hbar}{2mc} (k_1^2 - k_2^2); \quad (1a)$$

j — вектор плотности тока при переходе из состояния 1 (падающий электрон с волновым числом k_1) в состояние 2 (электрон, вылетающий в направлении α, β с волновым числом k_2). Согласно уравнению (15) на стр. 49 j даётся выражением ¹⁾

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\psi_2^* \text{grad} \psi_1 - \psi_1 \text{grad} \psi_2^*). \quad (2)$$

Таким образом, в (1) речь идёт о вычислении двух интегралов:

$$\left. \begin{aligned} I &= \int \psi_2^* \text{grad} \psi_1 e^{-ix(r^n)} d\tau, \\ II &= \int \psi_1 \text{grad} \psi_2^* e^{-ix(r^n)} d\tau, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

или, скорее, о тех частях I_{\perp}, II_{\perp} этих векторных величин, которые перпендикулярны к направлению наблюдения. Для этих величин справедливы соотношения

$$II_{\perp} = -I_{\perp}, (I - II)_{\perp} = 2I_{\perp}. \quad (3a)$$

Это следует из интегрирования по частям (при исчезновении поверхностного интеграла по бесконечно удалённой поверхности):

$$II = - \int \psi_2^* \text{grad} (\psi_1 e^{-ix(r^n)}) d\tau = - \int \psi_2^* \text{grad} \psi_1 e^{-ix(r^n)} d\tau + i x n \int \psi_2^* \psi_1 e^{-ix(r^n)} d\tau.$$

Второе слагаемое справа имеет направление n и, следовательно, отпадает при образовании компонент, имеющих вид в (3a). Поэтому последнее уравнение идентично с первым уравнением (3a). Второе уравнение (3a) является арифметическим следствием первого.

Благодаря обоим уравнениям (3a) можем вместо (1) написать:

$$E = \int \psi_2^* \text{grad} \psi_1 e^{-ix(r^n)} d\tau, \quad (4)$$

где, как и выше, опущены множители, которые нас здесь не интересуют. Конечно, под символом grad опять надо понимать grad_{\perp} . Сравнивая с этим уравнением уравнение (2.20б) для матричного элемента M , заметим, что интеграл в (4) — тот же самый, что и в (2.20б), и отличается лишь множителем $e^{-ix(r^n)}$ (запаздывание).

Мы хотим, так же как в § 2 этой главы, вынести градиент за знак интеграла. Для этого перейдём от градиента по радиус-вектору к градиенту по волновому числу k_1 и используем преобразование ²⁾ (2.20г):

$$\text{grad} \psi_1 = i k_1 \psi_1 - \frac{\hbar k_1}{r} e^{i(k_1 r)} \text{grad}_{k_1} L_n(\rho_1). \quad (5)$$

¹⁾ В указанном уравнении мы опустили временной множитель [так же как в уравнении (1)] и член с A , так как наше центральное поле состоит лишь из кулоновского потенциала $V = Ze^2/r$.

²⁾ Напоминаем о принятом там условии, что дифференцирование по k_1 не должно распространяться на n_1 , а только на случай явной зависимости от k_1 .

При подстановке в (4) от второго члена в правой части (5), если одновременно подставить для ψ_2^* (2.5), получаем:

$$E_2 = -k_1 \int e^{i(k_1 - k_2 - \kappa n, r)} \text{grad}_{k_1} (L_{n_1}(\rho) L_{n_2}(\rho_2)) \frac{d\tau}{r}. \quad (6)$$

Здесь множитель $L_{n_2}(\rho_2)$, не зависящий от k_1 , уже находится под знаком градиента. Чтобы можно было окончательно вынести градиент за знак интеграла, введём в экспоненту величину q [несколько изменяя определение (2.21a)]:

$$q = k_1 - k_2 - \kappa n, \quad (6a)$$

которая при дифференцировании по k_1 должна рассматриваться как постоянная. Тогда вместо (6) можем написать:

$$E_2 = -k_1 \text{grad}_{k_1} X. \quad (6б)$$

Введённое здесь выражение X , за исключением смысла q , подобно (2.8a), а именно:

$$X = \int e^{i(qr)} L_{n_1}(\rho_1) L_{n_2}(\rho_2) \frac{d\tau}{r}. \quad (6в)$$

Но у нас ещё остался первый член правой части (5), который при подстановке в (4) даёт:

$$E_1 = ik_1 \int \psi_1 \psi_2^* e^{-i\kappa(rn)} d\tau. \quad (7)$$

Этот интеграл исчезает при $\kappa = 0$ вследствие ортогональности ψ_1 и ψ_2 , поэтому его не было в расчёте в § 2. Конечно, от вектора k_1 в (7), так же как от градиента в (6б), берут лишь часть, перпендикулярную к n .

Чтобы вычислить E_1 , введём в (6в) бесконечно малый параметр ϵ и определим величину

$$Z = \int e^{i(qr) + \epsilon r} L_{n_1}(\rho_1) L_{n_2}(\rho_2) \frac{d\tau}{r}. \quad (7a)$$

Тогда, очевидно, имеем:

$$E_1 = k_1 \left(\frac{\partial Z}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0}. \quad (7б)$$

В качестве представления Z мы можем использовать уравнение (2.9) для X , если заменим в нём определение (2.10) для K_0 через

$$K_0 = i \{ k_1 v + k_2 u \} - i\epsilon,$$

оставляя определение для K_1 неизменным. Вследствие этого, если пренебречь членом с ϵ^2 , который всё равно исчезает после дифференцирования при $\epsilon = 0$, вместо (2.12a) получаются выражения:

$$\begin{aligned} U &= 2(qk_1) + 2\epsilon k_1 - 2\{k_1 k_2 + (k_1 k_2)\} u, \\ Uv_0 &= +2\{(qk_2) - \epsilon k_2\} u - q^2. \end{aligned}$$

Оба последних выражения отличаются от (2.12a) только заменой

$$\left. \begin{aligned} (qk_1) &\text{ на } (qk_1) + \epsilon k_1, \\ (qk_2) &\text{ на } (qk_2) - \epsilon k_2. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Вследствие этого также изменятся выражения (2.15) и (2.16a) для u_2 , u_3 и u . Окончательно получаем для X такое же представление, как для X

в (2.19), а именно:

$$Z = BF(-n_1, -n_2, 1, y) \quad (9)$$

с изменёнными по сравнению с (2.19а) и (2.16а) выражениями для B и y :

$$B = 4\pi \frac{[q^2 - 2(qk_1) - 2\epsilon k_1]^{n_1} [q^2 + 2(qk_2) - 2\epsilon k_2]^{n_2}}{q^2(n_1 + n_2 + 1)}, \quad (9a)$$

$$y = 2 \frac{q^2 [k_1 k_2 + (k_1 k_2)] - 2 [(qk_1) + \epsilon k_1] [(qk_2) - \epsilon k_2]}{[q^2 - 2(qk_1) - 2\epsilon k_1] [q^2 + 2(qk_2) - 2\epsilon k_2]}. \quad (9б)$$

Мы можем использовать эти же выражения для B и y также для вычисления X в (6б), так как для $\epsilon = 0$ они переходят в имеющиеся там в виду выражения для B и y (2.19а) и (2.16а). После этого введём ещё дифференциальное выражение

$$\text{Grad} = \text{grad}_k, - \frac{k_1}{k_1} \frac{\partial}{\partial \epsilon}, \quad (10)$$

с помощью которого можно объединить E_1 и E_2 в

$$E = E_2 + E_1 = -k_1 \text{Grad} \{BF(y)\}, \quad (10a)$$

при условии, что после выполнения операции градиента подставим

$$\epsilon = 0, \quad q = k_1 - k_2 - xn. \quad (10б)$$

Дифференцирование в (10а) даёт по образцу (2.23) выражение

$$\text{Grad} \{BF(y)\} = AF(x) \text{Grad} \ln B + AF'(x) x \text{Grad} \ln y. \quad (11)$$

Здесь под A и x подразумеваются те значения, которые получатся из (9а, б), если подставить в них ϵ и q из (10б).

Прежде всего рассмотрим входящий в (11) множитель $\text{Grad} \ln B$. Согласно (9а) и (10) для $\epsilon \rightarrow 0$ получаем:

$$\text{Grad} \ln B = \frac{2n_1(-q + k_1)}{q^2 - 2(qk_1)} + \frac{2n_2 k_2}{k_1} \frac{k_1}{q^2 + 2(qk_2)}. \quad (11a)$$

Во втором члене используем соотношение $n_2 k_2 = n_1 k_1$, а в числитель первого члена подставим

$$-q + k_1 = k_2 + xn = k_2$$

(последнее получается при условии, что в (10а) и поэтому также в (11) окончательно мы сохраняем только компоненты, перпендикулярные к n). Вследствие этого (11а) превращается в

$$\text{Grad} \ln B = 2n_1 \left[\frac{k_2}{q^2 - 2(qk_1)} + \frac{k_1}{q^2 + 2(qk_2)} \right]. \quad (11б)$$

Для облегчения сравнения с прежними формулами подставим сюда выражения:

$$\left. \begin{aligned} q^2 - 2(qk_1) &= -k_1^2 + k_2^2 + x^2 + 2x(k_2 n), \\ q^2 + 2(qk_2) &= k_1^2 - k_2^2 + x^2 - 2x(k_1 n). \end{aligned} \right\} \quad (11в)$$

Теперь видно, что (11б), как и должно быть, при $x = 0$ переходит в (2.23б).

Выражения (11в) ещё упрощаются, если пренебречь x^2 , что является последовательным шагом при нашем нерелятивистском расчёте. Подставляя x

из (1а), получим:

$$\left. \begin{aligned} q^2 - 2(qk_1) &= -(k_1^2 - k_2^2)(1 - \beta_2 \cos \theta), \\ q^2 + 2(qk_2) &= (k_1^2 - k_2^2)(1 - \beta_1 \cos \theta). \end{aligned} \right\} \quad (11г)$$

Здесь применены обозначения $\beta_1 = v_1/c$, $\beta_2 = v_2/c$, $\theta = \angle(\mathbf{v}_1, \mathbf{n})$, $\Theta = \angle(\mathbf{v}_2, \mathbf{n})$. Очевидно,

$$\cos \Theta = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta). \quad (11д)$$

Отметим ещё в качестве следствия (10б) (x^2 пренебрегаем):

$$q^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2 \cos \alpha - (k_1^2 - k_2^2)(\beta_1 \cos \theta - \beta_2 \cos \Theta). \quad (11е)$$

Из подстановки (11г) и (11б) следует формула

$$\text{Grad ln } B = \frac{2n_1}{k_1^2 - k_2^2} \left(\frac{k_1}{1 - \beta_1 \cos \theta} - \frac{k_2}{1 - \beta_2 \cos \Theta} \right). \quad (12)$$

Для полноты надо ещё вычислить имеющуюся в (11) величину $\text{Grad ln } y$. Мы указываем сразу же результат:

$$\text{Grad ln } y = \frac{2k_2}{k_1^2 - k_2^2} \left[\frac{k_1}{k_1(1 - \beta_1 \cos \theta)} - \frac{k_2}{k_2(1 - \beta_2 \cos \Theta)} \right] \frac{1-x}{x}. \quad (13)$$

Подставляя теперь (12) и (13) в (11), получим с помощью (10а) общее представление для поля излучения.

Но мы хотим ограничиться здесь достаточно жёстким падающим излучением и соответственно этому положим, как в (3.13а), $F = 1$, $F' = 0$. Тогда получается из (10а) и (12) выражение

$$E = - \frac{2k_1n_1}{k_1^2 - k_2^2} A \left(\frac{k_1}{1 - \beta_1 \cos \theta} - \frac{k_2}{1 - \beta_2 \cos \Theta} \right). \quad (14)$$

Разложим E на E_θ и E_φ по направлениям возрастающих θ и φ . Получим, следовательно, согласно уравнениям (2.28) и (2.29):

$$\begin{aligned} (k_1 e_\theta) &= -\sin \theta k_1, & (k_1 e_\varphi) &= 0, \\ (k_2 e_\theta) &= [-\sin \theta \cos \alpha + \cos \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)] k_2, \\ (k_2 e_\varphi) &= -\sin \alpha \sin(\varphi - \beta) k_2. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} E_\varphi &= - \frac{2k_1k_2n_1}{k_1^2 - k_2^2} A \frac{\sin \alpha \sin(\varphi - \beta)}{1 - \beta_2 \cos \Theta}, \\ E_\theta &= \frac{2k_1k_2n_1}{k_1^2 - k_2^2} A \left[\frac{k_1}{k_2} \frac{\sin \theta}{1 - \beta_1 \cos \theta} - \frac{\sin \theta \cos \alpha - \cos \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)}{1 - \beta_2 \cos \Theta} \right]. \end{aligned} \quad (14а)$$

Так как, согласно (9а), n_1 и n_2 — чисто мнимые величины, то

$$|A|^2 = |B|_{\theta=0}^2 = \left(\frac{4\pi}{q^2} \right)^2 \quad (15)$$

и потому, принимая во внимание (11в) и пренебрегая более высокими степенями от β_1 и β_2 , получаем:

$$\begin{aligned} |A|^2 &= \frac{16\pi^2}{(k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2 \cos \alpha)^2} \times \\ &\times \left\{ 1 + 2 \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2 \cos \alpha} (\beta_1 \cos \theta - \beta_2 \cos \Theta) \right\}. \end{aligned} \quad (15а)$$

Дальнейшие вычисления особенно просты для коротковолновой границы $k_2 = 0$, $\beta_2 = 0$. Первое уравнение (14а) тогда даёт:

$$|E_\varphi|^2 = 0. \quad (16)$$

Это значит, что излучение полностью поляризовано по направлению возрастающих ϑ в согласии с выводами, сделанными для нашего граничного случая из (3.15). Второе уравнение (14а) легко даёт:

$$|E_\vartheta|^2 = C \frac{\sin^2 \vartheta}{(1 - \beta_1 \cos \vartheta)^4}, \quad C = \frac{64\pi^2 |j_1|^2}{k_1^4}. \quad (17)$$

Следовательно, излучение для этого граничного случая в пределах точности нашего приближения не будет зависеть от углов α , β вылета электрона, так что мы имеем:

$$\int |E_\vartheta|^2 d\omega_{\alpha\beta} = 4\pi |E_\vartheta|^2.$$

Поэтому выражение (17) также пропорционально интенсивности J , отнесённой к интервалу частот $d\nu$. Мы приходим, таким образом, к замечательному факту, что для смещения распределения фотонов при жёстком первичном катодном излучении справедлив формально тот же самый закон, как и для фотоэлектронов при жёстком первичном рентгеновском излучении [см. уравнение (VI.1.4) с $\varphi = 0$], так что в отношении графического изображения теперешней (J , ϑ)-зависимости можно непосредственно сослаться на прежний рис. 26.

Положение максимума излучения исследуем особо. Из соотношения

$$\frac{d}{d\vartheta} \frac{\sin^2 \vartheta}{(1 - \beta_1 \cos \vartheta)^4} = 0$$

получается непосредственно

$$\cos \vartheta = 2\beta_1 \frac{\sin^2 \vartheta}{1 - \beta_1 \cos \vartheta}. \quad (18)$$

В нулевом приближении (без запаздывания, § 3) максимум лежал при $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, как в случае чистого дипольного излучения. Подставим это нулевое приближение в правую часть (18), при этом в качестве первого приближения получается:

$$\cos \vartheta = 2\beta_1. \quad (18a)$$

Мы имеем смещение максимума, которое растёт со скоростью падающих катодных лучей. С другой стороны, подставив это первое приближение в правую часть (18), получим (хотя мы выходим при этом за пределы точности нашего расчёта) в качестве второго приближения при разложении по β^2 :

$$\cos \vartheta = 2\beta_1 (1 - 2\beta_1^2). \quad (18b)$$

Наше второе приближение начерчено на рис. 35. Кружками обозначены наблюдения, которые были сделаны при различных напряжениях вблизи коротковолновой границы спектра. Они подтверждены наблюдениями Бома¹⁾ на тонких фольгах.

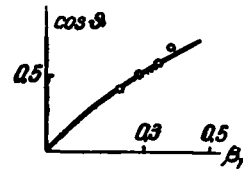


Рис. 35. Смещение максимума для коротковолновой границы как функция $\beta_1 = v/c$, сопоставленная с наблюдениями Куленкампа, обозначенными кружками.

¹⁾ K. B ö h m, Phys. Zs. 38, 334 (1937). Dissertation Jena, Ann. d. Phys. 33, 315 (1938). Он подтвердил уже замеченный Куленкампом тот факт, что опережение

С другой стороны, полученный в уравнении (18) факт, что смещение не зависит от материала антикатода, подтвержден Детерманном¹⁾ (бомбардировался полусферический антикатод из Be, C, Al). На основании этого ясно, что опережение является кинематическим явлением, обусловленным запаздыванием. Это снова отражается в очень простой форме основного уравнения (18), а также в том отношении, что смещение смогли объяснить в основном правильно уже с помощью классической физики задолго до возникновения волновой механики (ср. стр. 421).

§ 7. ОЧЕНЬ ЖЁСТКИЕ ЛУЧИ, ПЕРВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ПО ТЕОРИИ ДИРАКА

Представим дираковские собственные функции как начального, так и конечного состояния в виде разложений по степеням αZ (как в гл. V, § 8) и сохраним лишь первый поправочный член с αZ . Если одновременно скорости как падающего, так и вылетающего электрона очень велики, то по уравнению (V.8.22) n будет порядка αZ , так что будет логично пренебречь более высокими степенями n_1 (начальное состояние) и n_2 (конечное состояние). Мы становимся, тем самым, на точку зрения борновского приближения, но не хотим придерживаться, как в работах Заутера, Бете и Гайтлера, Шерцера, Бруннера, общей теории этого приближения, а лучше воспользуемся точными формулами из гл. V, § 8. Этим мы несколько сократим процесс приведения величин γ , но зато придётся взять несколько простых интегралов, которые в собственно борновском приближении можно вычислить с помощью разложения Фурье.

Соответственно этому опишем начальное состояние (падающий электрон) уравнением (V.8.24a):

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= e^{i(k_1 r)} \left\{ 1 - \frac{\beta_1}{2r} \gamma_4 \left(\gamma \frac{\partial}{\partial k_1} \right) \right\} L_{n_1}(\rho_1) \Gamma_1, \\ \rho_1 &= i[k_1 r - (k_1 r)] \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

и сопряжённое конечное состояние (заторможенный электрон) уравнением (V.8.26a), приняв во внимание замену (VI.4.2a):

$$\left. \begin{aligned} \bar{\psi}_2 &= \bar{\Gamma}_2 e^{i(k_2 r)} \left\{ 1 + \frac{\beta_2}{2r} \gamma_4 \left(\gamma \frac{\partial}{\partial k_2} \right) \right\} L_{n_2}(\rho_2), \\ \rho_2 &= i[k_2 r + (k_2 r)], \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

где Γ_1 и Γ_2 — зависящие от γ составляющие двух решений для уравнения Дирака без силового поля, принадлежащих k_1 и k_2 .

Для сокращения записи полагаем:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= e^{i k_1 r} \{ a_1 + \gamma_4 (\gamma b_1) \} \Gamma_1, \\ \bar{\psi}_2 &= \bar{\Gamma}_2 e^{-i(k_2 r)} \{ a_2 + \gamma_4 (\gamma b_2) \}; \\ a_1 &= L_{n_1}(\rho_1), \quad b_1 = -\frac{\beta_1}{2r} \frac{\partial}{\partial k_1} L_{n_1}(\rho_1); \\ a_2 &= L_{n_2}(\rho_2), \quad b_2 = +\frac{\beta_2}{2r} \frac{\partial}{\partial k_2} L_{n_2}(\rho_2). \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

на некотором расстоянии от коротковолновой границы ещё больше, чем на самой границе. Это получается также при волномеханическом расчёте и уже было указано в работе автора (примечание на стр. 424), рис. 11.

¹⁾ H. Deternann, Ann. d. Phys. 30, 481 (1937). Dissertation Danzig.

Величины b , как мы знаем, представляют собой поправочные члены порядка αZ , так что их произведением можно пренебречь.

А. Выражения для тока и излучения. Образует теперь выражения для дираковского тока с учётом запаздывания

$$\Gamma_0 j = ic e \bar{\psi}_2 \gamma \psi_1 e^{-i(xr)} \quad (5)$$

и сопряжённое ему выражение

$$\Gamma_0 j^* = ic e \bar{\psi}_1 \gamma \psi_2 e^{i(xr)}, \quad (5a)$$

где Γ_0 — обычный самосопряжённый и нормированный на 1 делитель нуля, как на стр. 212. Множитель ic в правой стороне (5) и (5a) соответствует множителю в уравнении (IV.3.14); множитель e показывает, что дело идёт далее об электрическом токе [а не о токе частиц, как в (IV.3.14)]; x обозначает волновое число излучения.

$$\left. \begin{aligned} x &= xn, \quad n \text{ — направление излучения;} \\ x &= \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{E_1 - E_2}{hc} \quad [\text{ср. также (6.1a)}]. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

При подстановке (3) в (5) и интегрировании по пространству появляются интегралы:

$$\left. \begin{aligned} J &= \int a_1 a_2 e^{i(Kr)} d\tau, \quad K = k_1 - k_2 - x, \\ J_1 &= \int a_2 b_1 e^{i(Kr)} d\tau, \quad J_2 = \int a_1 b_2 e^{i(Kr)} d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Два последних интеграла можно записать, согласно (4), следующим образом:

$$J_1 = -\frac{p_1}{2} \frac{\partial}{\partial k_1} X, \quad J_2 = \frac{p_2}{2} \frac{\partial}{\partial k_2} X, \quad (8)$$

$$X = \int L_{n_1}(\rho_1) L_{n_2}(\rho_2) e^{i(Kr)} \frac{d\tau}{r} \quad (9)$$

при условии, что K при дифференцировании в (8) рассматривается как постоянная.

Интеграл X уже появлялся в (2.8a) и был вычислен в (2.19), (2.19a). Мы возьмём $q = K$ и пренебрежём $n_1 n_2$, следовательно, положим $F = 1$. Поэтому получим:

$$X = 4\pi \frac{[K^2 - 2(Kk_1)]^{n_1} [K^2 + 2(Kk_2)]^{n_2}}{K^{2(n_1+n_2+1)}}. \quad (9a)$$

При дифференцировании по k_1, k_2 появляются множители n_1, n_2 , следовательно, получающиеся выражения будут першого порядка малости по n_1, n_2 , поэтому в множителях, стоящих при n_1, n_2 , положим $n_1 = n_2 = 0$. Получаем, таким образом, из (8) и (9a):

$$J_1 = \frac{4\pi p_1 n_1}{K^2} \frac{K}{K^2 - 2(Kk_1)}, \quad J_2 = \frac{4\pi p_2 n_2}{K^2} \frac{K}{K^2 + 2(Kk_2)}. \quad (10)$$

Также и интеграл J в (7) можно свести к определённомu в (6.7a) интегралу Z . а именно:

$$J = -i \left(\frac{\partial Z}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0}.$$

Поэтому, взяв выражения из (6.9) и (6.9а) (F опять полагаем равным единице, q равным K), получаем:

$$J = \frac{8\pi i}{K^2} \left(\frac{k_1 n_1}{K^2 - 2(Kk_1)} + \frac{k_2 n_2}{K^2 - 2(Kk_2)} \right). \quad (11)$$

Знаменатели выражений (10) и (11) упрощаются, если воспользоваться законом сохранения энергии для электрона 1 и 2, а именно:

$$\hbar^2 c^2 k_{1,2}^2 = E_{1,2}^2 - E_0^2, \quad (11a)$$

и уравнением (6) для фотона. Отсюда легко получаем, согласно определению (7), для K :

$$\left. \begin{aligned} \hbar^2 c^2 (K^2 - 2(Kk_1)) &= -2\hbar v \omega_2, & \omega_2 &= E_2 - \hbar c (k_2 n), \\ \hbar^2 c^2 (K^2 - 2(Kk_2)) &= 2\hbar v \omega_1, & \omega_1 &= E_1 - \hbar c (k_1 n). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Имеем, кроме того, по смыслу n_1, n_2 :

$$\beta_1 n_1 = \beta_2 n_2 = -\alpha Z, \quad k_1 n_1 = -\alpha Z \frac{E_1}{\hbar c}, \quad k_2 n_2 = -\alpha Z \frac{E_2}{\hbar c}. \quad (13)$$

Наконец, введя ещё вместо K импульс, передаваемый ядру в процессе торможения:

$$P = \hbar K, \quad (13a)$$

вместо (10) и (11) можем просто написать:

$$J_1 = iC \frac{cP}{\omega_2}, \quad J_2 = -iC \frac{cP}{\omega_1}, \quad J = 2C \left(\frac{E_2}{\omega_1} - \frac{E_1}{\omega_2} \right), \quad (14)$$

где

$$C = \frac{2\pi\alpha Z}{\hbar v} \frac{(\hbar c)^3}{c^2 P^2}. \quad (14a)$$

В заключение отметим ещё, что из (14) следует:

$$J'_1 = -J_1, \quad J'_2 = -J_2, \quad J' = J. \quad (14b)$$

Если мы хотим теперь из выражения (5) для потока рассчитать поле излучения, то оно зависит от части j , перпендикулярной к направлению наблюдения n , которая ранее была обозначена через j_{\perp} . Мы полагаем $j_{\perp} = (js)$, понимая под s единичный вектор, перпендикулярный к n , и образуем по (3), (4), (5):

$$\begin{aligned} \Gamma_0(js) &= ice\bar{\psi}_2(\gamma s) \psi_1 e^{-i(xr)} = \\ &= ice\bar{\Gamma}_2 [a_2 + \gamma_4(\gamma b_2)] (\gamma s) [a_1 + \gamma_4(\gamma b_1)] e^{i(Kr)} \Gamma_1. \end{aligned} \quad (15)$$

Полезно величину (γs) в (15) переставить с множителем, стоящим позади неё. Для этого вспомним формулы

$$(\gamma s) \gamma_4 = -\gamma_4(\gamma s), \quad (\gamma s)(\gamma b) = -(\gamma b)(\gamma s) + 2(bs). \quad (15a)$$

Тогда получаем из (15):

$$\begin{aligned} \Gamma_0(js) &= ice\bar{\Gamma}_2 [a_2 + \gamma_4(\gamma b_2)] [a_1 + \gamma_4(\gamma b_1)] (\gamma s) e^{i(Kr)} \Gamma_1 - \\ &\quad - 2ice\bar{\Gamma}_2 [a_2 + \gamma_4(\gamma b_2)] \gamma_4(b_1 s) e^{i(Kr)} \Gamma_1. \end{aligned} \quad (15b)$$

Отсюда следует после интегрирования по пространству, если пренебрежём членом с $(\alpha Z)^2$:

$$\Gamma_0 \int (js) d\tau = ice\bar{\Gamma}_2 \{J + \gamma_4(\gamma, J_1 + J_2)\} (\gamma s) \Gamma_1 - 2ice\bar{\Gamma}_2 \gamma_4 (J_1 s) \Gamma_1. \quad (16)$$

Сопряжённое выражение, принимая во внимание (14б), равно

$$\Gamma_0 \int (j^*s) d\tau = ice\bar{\Gamma}_1 (\gamma s) \{J + (\gamma, J_1 + J_2) \gamma_4\} \Gamma_2 - 2ice\bar{\Gamma}_1 (J_1 s) \gamma_4 \Gamma_2. \quad (16a)$$

Перемножая (16а) и (16), получаем (вспомним о нормировке $\Gamma_0^2 = \Gamma_0$):

$$-\frac{\Gamma_0}{c^2 \alpha^2} \left| \int (js) d\tau \right|^2 = \bar{\Gamma}_1 (\gamma s) \{I\} (\gamma s) \Gamma_1 - 2 (J_1 s) \bar{\Gamma}_1 \{III\} \Gamma_1 - \\ - 2 (J_1 s) \bar{\Gamma}_1 \{III\} \Gamma_1 + 4 (J_1 s)^2 \bar{\Gamma}_1 \{IV\} \Gamma_1, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \{I\} &= \{J + (\gamma, J_1 + J_2) \gamma_4\} \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2 \{J + \gamma_4(\gamma, J_1 + J_2)\}, \\ \{II\} &= (\gamma s) \{J + (\gamma, J_1 + J_2) \gamma_4\} \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2 \gamma_4, \\ \{III\} &= \gamma_4 \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2 \{J + \gamma_4(\gamma, J_1 + J_2)\} (\gamma s), \\ \{IV\} &= \gamma_4 \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2 \gamma_4. \end{aligned}$$

Б. Суммирование по обоим направлениям спина вылетающего электрона. Мы намерены в (17) (а следовательно, также и в выражениях {I} ... {IV}) провести суммирование по обоим направлениям спина вылетающего электрона, которые входят в $\Gamma_2, \bar{\Gamma}_2$. Оказывается, как мы несколько позже покажем, что

$$\sum \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2 = \frac{1}{2E_2} \{-i\hbar c(\gamma k_2) + \gamma_4 E_2 + E_0\}. \quad (18)$$

Отсюда сразу следует:

$$2E_2 \sum \{IV\} = i\hbar c(\gamma k_2) + \gamma_4 E_2 + E_0. \quad (19)$$

Затем выполним умножение в {III} и составим:

$$2E_2 \sum \{III\} = \{E_2 J + E_2 \gamma_4(\gamma, J_1 + J_2) + E_0 \gamma_4 J + \\ + E_0(\gamma, J_1 + J_2) - i\hbar c J \gamma_4(\gamma k_2) + i\hbar c(\gamma, J_1 + J_2)(\gamma k_2)\} (\gamma s). \quad (20)$$

Из (18) видно, что выражение $\sum \Gamma_2 \bar{\Gamma}_2$ является самосопряжённым. Из этого и из (14б) следует, что {II} сопряжено с {III}. Напишем на основании этого из (20) следующее выражение для {II}:

$$2E_2 \sum \{II\} = (\gamma s) \{E_2 J + E_2(\gamma, J_1 + J_2) \gamma_4 + E_0 \gamma_4 J + \\ + E_0(\gamma, J_1 + J_2) - i\hbar c J(\gamma k_2) \gamma_4 + i\hbar c(\gamma, J_1 + J_2)(\gamma k_2)\}. \quad (20a)$$

Сумма обоих выражений (20) и (20а) даёт вследствие (15а):

$$E_2 \sum (\{II\} + \{III\}) = E_2 J(\gamma s) + E_2 \gamma_4(s, J_1 + J_2) + E_0(s, J_1 + J_2) - i\hbar c J \gamma_4(k_2 s) + \\ + i\hbar c \{(s, J_1 + J_2)(\gamma k_2) + (\gamma s)(J_1 + J_2, k_2) - (k_2 s)(\gamma, J_1 + J_2)\}. \quad (21)$$

Наконец, выполним умножение в $\sum \{I\}$:

$$2E_2 \sum \{I\} = -i\hbar c (\gamma k_2) [J^2 + (J_1 + J_2)^2] + \\ + 2 [JE_2 + i\hbar c (k_2, J_1 + J_2)] (\gamma, J_1 + J_2) + \gamma_4 \{E_2 [J^2 - (J_1 + J_2)^2] + \\ + 2i\hbar c J(k_2, J_1 + J_2)\} + E_0 [J^2 + (J_1 + J_2)^2]. \quad (22)$$

Три выражения (19), (21), (22) стали теперь линейны относительно γ и будут свободны от γ [с точностью до общего нормировочного множителя Γ_0 , который, однако, в следующих выражениях (23) — (28) мы будем опускать], если мы их [ср. с (17)] помножим справа и слева на $\bar{\Gamma}_1 \dots \Gamma_1$ или $\bar{\Gamma}_1(\gamma s) \dots (\gamma s) \Gamma_1$. Из теории релятивистского фотоэффекта нам известны три соотношения [уравнение (34) на стр. 416], которые в наших теперешних обозначениях записываются следующим образом:

$$\bar{\Gamma}_1 \Gamma_1 = \frac{E_0}{E_1}, \quad \bar{\Gamma}_1 \gamma_4 \Gamma_1 = 1, \quad \bar{\Gamma}_1 \gamma \Gamma_1 = \frac{-i\hbar c}{E_1} k_1. \quad (23)$$

Отсюда легко выводим дальнейшие три соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Gamma}_1(\gamma s) (\gamma s) \Gamma_1 &= \frac{E_0}{E_1}, & \bar{\Gamma}_1(\gamma s) \gamma_4 (\gamma s) \Gamma_1 &= -1, \\ \bar{\Gamma}_1(\gamma s) \gamma (\gamma s) \Gamma_1 &= \frac{i\hbar c}{E_1} \{k_1 - 2(k_1 s) s\}. \end{aligned} \right\} \quad (23a)$$

Из (23) вытекает вследствие (19), что $\sum \{IV\}$ даёт следующий вклад в правую часть (17):

$$2(J_1 s)^2 \left\{ 1 + \frac{\hbar^2 c^2 (k_1 k_3) + E_0^2}{E_1 E_2} \right\}, \quad (24)$$

а вклад от $\sum \{II\} + \sum \{III\}$, согласно (21), есть

$$-2(J_1 s) \left\{ (s, J_1 + J_2) \left(1 + \frac{\hbar^2 c^2 (k_1 k_3) + E_0^2}{E_1 E_2} \right) - i\hbar c J \left[\frac{(s k_1)}{E_1} + \frac{(s k_2)}{E_2} \right] + \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2 c^2}{E_1 E_2} [(k_1 s)(k_2, J_1 + J_2) - (k_2 s)(k_1, J_1 + J_2)] \right\}. \quad (25)$$

Наконец, из (23a) и (22) в качестве вклада от $\sum \{I\}$ получаем:

$$\frac{1}{2E_1 E_2} \{ \hbar^2 c^2 [J^2 + (J_1 + J_2)^2] [(k_1 k_2) - 2(k_1 s)(k_2 s)] + \\ + 2i\hbar c J [(E_2 k_1 - E_1 k_2, J_1 + J_2) - 2E_2 (k_1 s)(J_1 + J_2, s)] - \\ - E_1 E_2 [J^2 - (J_1 + J_2)^2] + E_0^2 [J^2 + (J_1 + J_2)^2] - \\ - 2\hbar^2 c^2 (k_2, J_1 + J_2) [(k_1, J_1 + J_2) - 2(k_1 s)(s, J_1 + J_2)] \}. \quad (26)$$

Три вышеуказанных выражения, как видно, не зависят от специального выбора спинного оператора Γ_1 . Это получилось потому, что приведённые выражения (19), (21), (22) были линейны по γ . Физически это означает следующее: если совместно рассматривать оба возможных спинных состояния заторможенного электрона [соответствует суммированию в уравнении (18)], то процессы торможения и его излучения больше не зависят от спинного состояния падающего электрона.

Объединим выражения (24), (25), (26) и обозначим через Q_1 члены с множителем J^2 , через Q_2 — члены с множителями JJ_1 и JJ_2 и через Q_3 — осталь-

ные члены с множителями J_1^2 , J_2^2 , $J_1 J_2$. Мы получаем:

$$Q_1 = \frac{1}{2E_1 E_2} J^2 \{ \hbar^2 c^2 [(k_1 k_2) - 2(k_1 s)(k_2 s)] - E_1 E_2 + E_0^2 \},$$

$$Q_2 = \frac{1}{E_1 E_2} i \hbar c J \{ (E_2 k_1 - E_1 k_2, J_1 + J_2) + 2E_1 (k_2 s)(J_1 s) - 2E_2 (k_1 s)(J_2 s) \},$$

$$Q_3 = \frac{1}{2E_1 E_2} (J_1 + J_2)^2 \{ \hbar^2 c^2 [(k_1 k_2) - 2(k_1 s)(k_2 s)] + E_1 E_2 + E_0^2 \} -$$

$$- \frac{2}{E_1 E_2} (J_1 s) \{ \hbar^2 c^2 (k_1 k_2) + E_1 E_2 + E_0^2 \} + \frac{\hbar^2 c^2}{E_1 E_2} \{ 2(J_1 s)(k_2 s)(k_1, J_1 + J_2) +$$

$$+ 2(J_2 s)(k_1 s)(k_2, J_1 + J_2) - (k_1, J_1 + J_2)(k_2, J_1 + J_2) \}.$$

В. Суммирование по обоим направлениям поляризации излучения s_1 , s_2 . Теперь мы намерены переписать выражения Q для двух направлений $s = s_1$ и $s = s_2$, перпендикулярных друг к другу и к направлению излучения n . При этом воспользуемся формулой (p и q — произвольные векторы)

$$\sum_i (ps_i)(qs_i) = ([pn], [qn]) = (pq) - (pn)(qn). \quad (27)$$

Она будет непосредственно понятна, если заменить s_1 , s_2 , n через x , y , z , так как тогда все три части двойного соотношения (27) перейдут в $p_x q_x + p_y q_y$. Таким образом, будет, например:

$$\sum (J_1 s_i)(k_2 s_i) = (J_1 k_2) - (J_1 n)(k_2 n). \quad (27a)$$

С другой стороны, заметим, что члены, свободные от s , при нашем суммировании, очевидно, приобретают множитель 2. Таким образом, наши выражения Q переходят в

$$\sum Q_1 = \frac{1}{E_1 E_2} J^2 \{ \hbar^2 c^2 (k_1 n)(k_2 n) - E_1 E_2 + E_0^2 \},$$

$$\sum Q_2 = \frac{2}{E_1 E_2} i \hbar c J \{ E_2 (k_1 J_1) - E_1 (k_2 J_2) - E_1 (k_2 n)(J_1 n) + E_2 (k_1 n)(J_2 n) \},$$

$$\sum Q_3 = \frac{1}{E_1 E_2} (J_1 + J_2)^2 \{ \hbar^2 c^2 (k_1 n)(k_2 n) + E_1 E_2 + E_0^2 \} -$$

$$- \frac{2}{E_1 E_2} \{ (J_1 J_2) - (J_1 n)(J_2 n) \} \{ \hbar^2 c^2 (k_1 k_2) + E_1 E_2 + E_0^2 \} +$$

$$+ \frac{2\hbar^2 c^2}{E_1 E_2} \{ (J_1 k_2)(J_2 k_1) - (J_1 k_1)(J_2 k_2) - (J_1 n)(k_2 n)(k_1, J_1 + J_2) -$$

$$- (J_2 n)(k_1 n)(k_2, J_1 + J_2) \}.$$

Сумма этих трёх выражений, умноженная ещё на опущенный ранее множитель Γ_0 , представляет правую сторону уравнения (17), просуммированную по $s = s_1$, s_2 . В левой стороне того же уравнения получится при прежнем обозначении j_{\perp} :

$$\left| \int (j s_1) d\tau \right|^2 + \left| \int (j s_2) d\tau \right|^2 = \left| \int j_{\perp} d\tau \right|^2.$$

Следовательно, уравнение (17), просуммированное по s_1 , s_2 , принимает вид:

$$\left| \int j_{\perp} d\tau \right|^2 = -c^2 e^2 \sum (Q_1 + Q_2 + Q_3). \quad (28)$$

Г. Вывод формулы (18). Прежде чем продолжать расчёт, мы должны доказать справедливость соотношения (18). Решающим является здесь порядок следования операторов $\Gamma\bar{\Gamma}$. Если бы $\bar{\Gamma}$ и Γ стояли в обратном порядке, то мы могли бы непосредственно указать результат суммирования с помощью первого из уравнений (23). Именно, мы получили бы одно и то же значение для каждого из обоих направлений спина в отдельности. Напротив, в уравнении (18) речь идёт о суммировании по обоим направлениям спина. Это обстоятельство является причиной того, что рассматриваемая величина

$$X = \sum \Gamma\bar{\Gamma} \quad (29)$$

должна обладать полной симметрией по отношению к направлению распространения k данной плоской волны. Следовательно, если направим, например, ось z по направлению k , то X не должно зависеть от единичных векторов γ_1 и γ_2 , лежащих в направлениях x и y . В силу этого наиболее общее выражение для X будет иметь вид:

$$X = a + ib\gamma_3 + e\gamma_4 + d\gamma_{34}. \quad (30)$$

Вследствие уравнения (29) X является самосопряжённым. Поэтому коэффициенты a, b, e, d действительны. Они определяются из двух уравнений, которым удовлетворяет X :

$$LX = 0 \quad \text{и} \quad XL = 0, \quad (31)$$

со специальным значением дираковского оператора для нашего выбора координат

$$L = i\gamma_3 k - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0). \quad (32)$$

В самом деле, ведь Γ определено как множитель собственной функции

$$u = e^{iks - i\omega t} \Gamma,$$

которая удовлетворяет уравнению $L(u) = 0$. Отсюда следует, что $L\Gamma = 0$, следовательно, также $LX = 0$. С другой стороны, $\bar{\Gamma}$ определяется как множитель сопряжённой собственной функции

$$v = e^{-iks + i\omega t} \bar{\Gamma}.$$

Так как L [уравнение (32)] для плоской волны является самосопряжённым, то отсюда следует, что $\bar{\Gamma}L = 0$, следовательно, также $XL = 0$ в соответствии с нашим утверждением в (31). Поэтому наши уравнения для определения a, b, e, d дают:

$$\left. \begin{aligned} \left\{ i\gamma_3 k - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0) \right\} \{ a + ib\gamma_3 + e\gamma_4 + d\gamma_{34} \} &= 0, \\ \{ a + ib\gamma_3 + e\gamma_4 + d\gamma_{34} \} \left\{ i\gamma_3 k - \frac{1}{\hbar c} (\gamma_4 E - E_0) \right\} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Здесь после выполнения умножения множители при 1, $\gamma_3, \gamma_4, \gamma_{34}$ должны по отдельности равняться нулю. Таким образом, получаем:

$$(1) \quad -kb - \frac{E}{\hbar c} e + \frac{E_0}{\hbar c} a = 0,$$

$$(\gamma_3) \quad k a \pm \frac{E}{\hbar c} d + i \frac{E_0}{\hbar c} b = 0,$$

$$(\gamma_4) \quad \pm ikd - \frac{E}{\hbar c} a + \frac{E_0}{\hbar c} e = 0,$$

$$(\gamma_{34}) \quad \pm ike \pm \frac{E}{\hbar c} ib + \frac{E_0}{\hbar c} d = 0,$$

причём верхний знак относится к первому, а нижний ко второму уравнению (33). Из трёх последних уравнений, очевидно, следует (D — множитель пропорциональности):

$$a = E_0 D, \quad b = -\hbar ck D, \quad e = ED, \quad d = 0;$$

тогда вследствие закона сохранения энергии само собой удовлетворится первое уравнение.

Наш прежний результат гласит согласно (30):

$$X = D \{ -i\hbar ck \gamma_3 + \gamma_4 E + E_0 \}. \quad (34)$$

Остаётся ещё определить D . Для этого служат условия нормировки и ортогональности, в которых мы обозначаем оба спиновых оператора Γ , по которым суммировали в (24), через Γ_+ , Γ_- :

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Gamma}_+ \gamma_4 \Gamma_+ &= \bar{\Gamma}_- \gamma_4 \Gamma_- = \Gamma_0, \\ \bar{\Gamma}_+ \gamma_4 \Gamma_- &= \bar{\Gamma}_- \gamma_4 \Gamma_+ = 0. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Составим выражение:

$$Y = \bar{\Gamma}_+ \gamma_4 (\Gamma_+ \bar{\Gamma}_+ + \Gamma_- \bar{\Gamma}_-) \gamma_4 \Gamma_+; \quad (36)$$

вследствие (35) имеем:

$$Y = \Gamma_0 \cdot \Gamma_0 + 0 \cdot 0 = \Gamma_0. \quad (36a)$$

Так как, с другой стороны, заключённая в скобки часть (36) равна X , то справедливо также в силу (34)

$$Y = D \bar{\Gamma}_+ \gamma_4 \{ -\hbar ck \gamma_3 + \gamma_4 E + E_0 \} \gamma_4 \Gamma_+ = D \bar{\Gamma}_+ \{ i\hbar ck \gamma_3 + \gamma_4 E + E_0 \} \Gamma_+$$

или, ссылаясь на (23),

$$Y = \frac{D}{E} \{ (\hbar ck)^2 + E^2 + E_0^2 \} \Gamma_0 = 2DE \Gamma_0; \quad (36b)$$

последнее — по закону сохранения энергии $(\hbar ck)^2 = E^2 - E_0^2$. Сравнение (36a) и (36b) теперь непосредственно даёт:

$$D = \frac{1}{2E}. \quad (37)$$

Подставляя это в (34) и устраняя специальный выбор координат, т. е. заменяя $\hbar k \gamma_3$ через $(\hbar \gamma)$, мы получим уравнение (18).

Д. Окончательный расчёт излучения. Вернёмся назад к уравнению (28) и обратимся к преобразованию $\sum Q_1 + Q_2 + Q_3$. Мы выполним его, введя вместо волновых чисел k , K соответствующие импульсы p , P . Тогда уравнения (12) запишутся в виде:

$$\left. \begin{aligned} c(p_1 n) &= E_1 - \omega_1, \\ c(p_2 n) &= E_2 - \omega_2, \end{aligned} \right\} \quad (38a)$$

$$\left. \begin{aligned} c^2(P p_1) &= \hbar \nu \omega_2 + \frac{1}{2} c^2 P^2, \\ c^2(P p_2) &= \hbar \nu \omega_1 - \frac{1}{2} c^2 P^2. \end{aligned} \right\} \quad (38b)$$

Из уравнения (13a), определяющего P , и из (38a) легко показать, что

$$c(P n) = -\omega_1 + \omega_2, \quad (38b)$$

$$c^2(p_1 p_2) = E_1 E_2 - E_0^2 + \hbar \nu \omega_1 - \hbar \nu \omega_2 - \frac{1}{2} c^2 P^2. \quad (38g)$$

Впрочем, для того чтобы выявить связь с формулами прошлых параграфов и с встречающимся там выражением

$$\sin \vartheta = \frac{1}{p_1} |[p_1 n]|, \quad \vartheta = (\widehat{p_1, n}),$$

выразим скалярное произведение (p, n) через векторное произведение $[pn]$. Это делается с помощью трёх формул, которые мы напомним вместе:

$$c^2(p_1 n)(p_2 n) - E_1 E_2 + E_0^2 = -c^2 [p_1 n]^2 + E_1(\omega_1 - \omega_2) + \omega_1(h\nu - \omega_1 + \omega_2), \quad (39a)$$

$$= -c^2 [p_2 n]^2 + E_2(\omega_2 - \omega_1) + \omega_2(-h\nu - \omega_2 + \omega_1), \quad (39б)$$

$$= -c^2 ([p_1 n][p_2 n]) + h\nu(\omega_1 - \omega_2) - \frac{1}{2} c^2 p^2. \quad (39в)$$

Чтобы доказать первое уравнение (39а), используем тождество

$$c^2(p_1 n)(p_2 n) = c^2(p_1 n)^2 - c^2(p_1 n)[(p_1 n) - (p_2 n)]. \quad (40)$$

Здесь первый член справа по обычной теореме Пифагора равен

$$c^2 p_1^2 - c^2 [p_1 n]^2 = E_1^2 - E_0^2 - c^2 [p_1 n]^2. \quad (40a)$$

Второй член справа в (40), согласно (38а), равен

$$-(E_1 - \omega_1)(h\nu - \omega_1 + \omega_2). \quad (40б)$$

Поэтому имеем вместо (40)

$$c^2(p_1 n)(p_2 n) = -c^2 [p_1 n]^2 + E_1(\omega_1 - \omega_2) + \omega_1(h\nu - \omega_1 + \omega_2) + E_1^2 - E_0^2 - E_1 h\nu,$$

а это уравнение вследствие $h\nu = E_1 - E_2$ совпадает с (39а); (39б) следует из (39а), если поменять индексы 1 и 2 (при этом знак у $h\nu$ меняется на обратный); (39в) в силу (38г) тождественно с теоремой косинусов в сферическом треугольнике, натянутом между векторами p_1, p_2, n (ср. рис. 3б):

$$(p_1 n)(p_2 n) = (p_1 p_2) - ([p_1 n], [p_2 n]). \quad (41)$$

Перепишем теперь выражение $\sum Q_1$ со стр. 457 и подставим значение J из (14):

$$\sum Q_1 = \frac{4C^3}{E_1 E_2} \left(\frac{E_1^3}{\omega_1^2} + \frac{E_2^3}{\omega_2^2} - \frac{2E_1 E_2}{\omega_1 \omega_2} \right) \{ \}.$$

Указанные здесь фигурные скобки, которые совпадают с левой частью (39а, б, в) при умножении на $E_1^2/\omega_1^2, E_2^2/\omega_2^2, 2E_1 E_2/\omega_1 \omega_2$ заменим через (39а), (39б), (39в) соответственно. При этом перепишем лишь член с векторным произведением, а остальные члены обозначим многоточием. Получаем, таким образом:

$$\sum Q_1 = -\frac{4C^3 c^3}{E_1 E_2} \left(\frac{E_1^3 [p_1 n]^2}{\omega_1^4} + \frac{E_2^3 [p_2 n]^2}{\omega_2^4} - \frac{2E_1 E_2 ([p_1 n][p_2 n])}{\omega_1 \omega_2} \right) + \dots \quad (42)$$

Затем перепишем первую строку выражения $\sum Q_3$ со стр. 457 и подставим J_1, J_2 из (14):

$$\sum Q_3 = \frac{C^2 c^3 p^2}{E_1 E_2} \left(-\frac{1}{\omega_1^2} - \frac{1}{\omega_2^2} + \frac{2}{\omega_1 \omega_2} \right) \{ \}' + \dots$$

{ }' с точностью до знака перед $E_1 E_2$ совпадает с левой стороной (39а, б, в). Прибавим к правым частям этих уравнений $2E_1 E_2$ и назовём эти новые уравнения (39а', б', в'). При умножении { }' на $-\frac{1}{w_1^2}$, $-\frac{1}{w_2^2}$, $\frac{2}{w_1 w_2}$ используем (39а), (39б), (39в) соответственно. Вследствие этого получаем, если опять выписать только векторные произведения:

$$\sum Q_3 = \frac{C^2 c^2 P^2}{E_1 E_2} \left(\frac{c^2 [p_1 n]^2}{w_1^2} + \frac{c^2 [p_2 n]^2}{w_2^2} - \frac{2c^2 ([p_1 n], [p_2 n])}{w_1 w_2} \right) + \dots \quad (43)$$

Расчёт дополнительных членов, обозначенных здесь многоточием [сюда входят члены, не переписанные из (39а', б', в') и из второй — четвертой строк выражения для $\sum Q_3$ на стр. 457], является довольно сложным; он даёт:

$$-\frac{2C^2}{E_1 E_2} \left(E_1 E_2 c^2 P^2 \left(\frac{1}{w_1^2} + \frac{1}{w_2^2} \right) + (E_1^2 + E_2^2) \left(2 - \frac{w_2}{w_1} - \frac{w_1}{w_2} \right) \right). \quad (44)$$

С другой стороны, сумма дополнительных членов в (42) и ещё не переписанного выражения для $\sum Q_3$ получается в виде:

$$\frac{2C^2}{E_1 E_2} \left(2E_1 E_2 \left(2 - \frac{w_2}{w_1} - \frac{w_1}{w_2} \right) + c^2 P^2 \left\{ E_1 E_2 \left(\frac{1}{w_1^2} + \frac{1}{w_2^2} \right) - \frac{h^2 v^2}{w_1 w_2} \right\} \right). \quad (45)$$

Учитывая, что $E_1 - E_2 = h\nu$ и т. д., получим:

$$\begin{aligned} (44) + (45) &= -\frac{2C^2}{E_1 E_2} h^2 v^2 \left(2 - \frac{w_2}{w_1} - \frac{w_1}{w_2} + \frac{c^2 P^2}{w_1 w_2} \right) = \\ &= -\frac{2C^2}{E_1 E_2} \frac{h^2 v^2}{w_1 w_2} [c^2 P^2 - (w_1 - w_2)^2]. \end{aligned}$$

Используем ещё уравнение (38а) и очевидное соотношение

$$P^2 = (Pn)^2 + [Pn]^2.$$

Таким образом, получим окончательно:

$$(44) + (45) = -\frac{2C^2 c^2}{E_1 E_2} \frac{h^2 v^2}{w_1 w_2} [Pn]^2.$$

Отсюда из (41), (42) следует:

$$\begin{aligned} \sum (Q_1 + Q_2 + Q_3) &= -\frac{C^2 c^2}{E_1 E_2} \left\{ \frac{4E_2^2 - c^2 P^2}{w_1^2} [p_1 n]^2 + \frac{4E_1^2 - c^2 P^2}{w_2^2} [p_2 n]^2 - \right. \\ &\quad \left. - 2 \frac{4E_1 E_2 - c^2 P^2}{w_1 w_2} ([p_1 n], [p_2 n]) + 2 \frac{h^2 v^2}{w_1 w_2} [Pn]^2 \right\}. \quad (46) \end{aligned}$$

Тем самым мы нашли результат, который впервые был выведен в работе Заутера, уравнение (9), цитированной на стр. 425.

Получаем теперь, согласно (28), если подставим значение для C из (14а):

$$\left| \int j_{\perp} d\tau \right|^2 = \frac{\alpha^2 Z^2 h^4 c^4 e^2}{\sqrt{2} P^4 E_1 E_2} \{ \} N_1^2 N_2^2, \quad (47)$$

где { } имеет то же самое значение, что и в (46).

Присоединённые с правой стороны нормировочные множители относятся: N_1 — к падающей, N_2 — к вылетающей частице. Первую мы нормируем, как на стр. 438, на плотность тока, равную 1 на cm^2 . Это даёт, согласно (3.10в),

при $n_1 \rightarrow 0$ и $v_1 \rightarrow c$

$$N_1^2 = \frac{2\pi m}{k_1 h} = \frac{m}{p_1} = \frac{1}{c}. \quad (47a)$$

Вторую нормируем, как на стр. 119, на единичный объём пространства волновых чисел:

$$N_2^2 = \frac{1}{(2\pi)^3}.$$

Элемент объёма пространства волновых чисел равен

$$k_2^2 dk_2 d\omega.$$

Поэтому при нормировке на единичный элемент объёма

$$N_2^2 = \frac{1}{(2\pi)^3} k_2^2 dk_2 d\omega. \quad (47b)$$

Для энергий $E_2 \gg E_0$ из закона сохранения энергии для вылетающего электрона приближённо получаем:

$$ch k_2 = E_2.$$

При этом (47b) переходит в

$$N_2^2 = \frac{E_2^2}{c^3 h^3} dE_2 d\omega. \quad (47в)$$

Так как $h\nu = E_1 - E_2$, мы можем ещё выразить dE_2 через $h|d\nu|$.

Тогда получаем, принимая во внимание (47a):

$$N_1^2 N_2^2 = \frac{E_2^2}{c^4 h^3} h |d\nu| d\omega \quad (47г)$$

и вместо (47)

$$\left| \int j_{\perp} d\tau \right|^2 = \frac{\alpha^2 Z^3 h e^2 c^3 E_2}{(2\pi)^4 P^4 E_1} \left\{ \right\} \frac{h |d\nu|}{\nu^2} d\omega. \quad (48)$$

Чтобы получить отсюда само излучение, воспользуемся уравнением (I. 8.21)¹⁾. Из него получаем в качестве среднего по времени от $|\overline{EH}|$ (равно среднему по времени от E^2):

$$|\overline{EH}| = \frac{8\pi^2 \nu^2}{c^4} \frac{1}{R^2} \left| \int j_{\perp} d\tau \right|^2.$$

Поэтому средний поток энергии через единицу поверхности равен

$$\overline{S} = \frac{c}{4\pi} |\overline{EH}| = \frac{\alpha^2 Z^3 h^2 e^2 E_2}{(2\pi)^3 R^2 c P^4 E_1} \left\{ \right\} |d\nu| d\omega.$$

Обозначим через $J_{\nu} d\nu$ интенсивность от участка спектра $d\nu$, которая излучается в телесном угле $d\Omega$. Таким образом, имеем:

$$J_{\nu} d\nu = R^2 d\Omega \overline{S}$$

и поэтому

$$J_{\nu} = \frac{\alpha^2 Z^3 h^2 e^2 E_2}{(2\pi)^3 c} \frac{E_2}{E_1} H d\omega d\Omega, \quad (49)$$

где

$$H = \frac{1}{P^4} \left\{ \right\}, \quad (49a)$$

причём $\left\{ \right\}$ имеет то же самое значение, что и в (46).

¹⁾ Заметим, что добавленный там множитель запаздывания уже содержится в нашем теперешнем определении (5) для j .

Е. Переход от элементарного к интегральному процессу. Полученные нами до сих пор результаты изображают элементарный процесс: электрон с заданным импульсом p_1 падает в единицу времени на единицу поверхности и вылетает внутри телесного угла $d\omega$ с определённым импульсом p_2 ; одновременно излучается фотон в направлении n в телесном угле $d\Omega$. Энергия фотона и переданный ядру импульс P определяются через p_1 , p_2 и n . Импульсы p_1 , p_2 , так же как направление n , остаются произвольными (если отвлечься от самого собой разумеющегося условия $p_2 < p_1$). Но существует вероятностная связь между p_1 , p_2 и n , которая соответствует обсуждённому в предыдущих параграфах опережению: при больших энергиях E_1 , E_2 (большие импульсы p_1 , p_2) три вектора p_1 , p_2 , n сближаются теснее, т. е. вероятность сильного расхождения этих трёх векторов стремится к нулю при увеличении энергии.

Рис. 36 показывает сферический треугольник на сфере единичного радиуса, вершинами которого являются точки пересечения этой сферы и векторов n , p_1 , p_2 ; на этом же рисунке даны обозначения углов, используемые нами в дальнейшем.

В этих обозначениях имеем:

$$\left. \begin{aligned} |[p_1 n]| &= p_1 \sin \vartheta, \quad |[p_2 n]| = p_2 \sin \alpha, \\ ([p_1 n], [p_2 n]) &= p_1 p_2 \sin \vartheta \sin \alpha \cos \beta. \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

Далее, согласно (38а),

$$\omega_1 = E_1 - cp_1 \cos \vartheta, \quad \omega_2 = E_2 - cp_2 \cos \alpha \quad (50a)$$

и так как $P = p_1 - p_2 - \frac{h\nu}{c} n$, то

$$\left. \begin{aligned} P^2 &= A + B \cos \beta, \quad B = -2p_1 p_2 \sin \vartheta \sin \alpha, \\ A &= p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 \cos \vartheta \cos \alpha, \\ &= + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu}{c} (p_1 \cos \vartheta - p_2 \cos \alpha). \end{aligned} \right\} \quad (50b)$$

Если подставим это в (49), то получим угловую зависимость излучения в данном элементарном процессе.

Но нас интересует не элементарный, а *интегральный процесс*, которому соответствуют при фиксированных частоте и направлении излучения (ν и n) все возможные направления α , β вылетающего электрона. В соответствии с этим мы должны ещё в (49) произвести, правда элементарное, но несколько-длинное интегрирование по

$$d\omega = \sin \alpha \, d\alpha \, d\beta.$$

(Малость α , ϑ при этом ещё не используется.)

Рассчитаем в качестве примера первое слагаемое, которое, если опустить постоянные (или зависящие только от ϑ) множители (как $[p_1 n]^2$ и ω_1^2), равно-

$$\int \frac{d\omega}{P^4} = \int_0^\pi \sin \alpha \, d\alpha \int_0^{2\pi} \frac{d\beta}{(A + B \cos \beta)^2}. \quad (51)$$

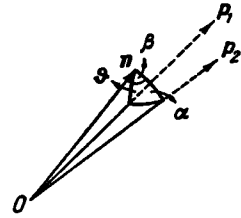


Рис. 36. Расположение направления излучения n относительно импульсов p_1 и p_2 при больших энергиях.

Интеграл по β легко берётся. Вследствие

$$\int \frac{d\beta}{A + B \cos \beta} = \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - B^2}}$$

имеем:

$$\int \frac{d\beta}{(A + B \cos \beta)^2} = -2\pi \frac{\partial}{\partial A} (A^2 - B^2)^{-1/2} = \frac{2\pi A}{(A^2 - B^2)^{3/2}}. \quad (51a)$$

Чтобы выполнить интегрирование по α , используем в качестве переменной $y = \cos \alpha$ и положим [ср. (50б)]:

$$A = A_0 + A_1 y, \quad B^2 = B_0^2 (1 - y^2), \quad (51б)$$

$$\left. \begin{aligned} A_0 &= p_1^2 + p_2^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - \frac{2h\nu}{c} p_1 \cos \vartheta, \\ A_1 &= 2p_2 \left(\frac{h\nu}{c} - p_1 \cos \vartheta\right), \quad B_0 = -2p_1 p_2 \sin \vartheta, \end{aligned} \right\} \quad (51в)$$

$$\left. \begin{aligned} A^2 - B^2 &= a + 2by + cy^2, \\ a &= A_0^2 - B_0^2, \quad b = A_0 A_1, \quad c = A_1^2 + B_0^2. \end{aligned} \right\} \quad (51г)$$

Имеем тогда

$$\int \frac{d\omega}{P^4} = 2\pi \int_{-1}^{+1} \frac{A_0 + A_1 y}{(a + 2by + cy^2)^{3/2}} dy. \quad (52)$$

Вычисляя неопределённый интеграл, получаем:

$$\frac{C_0 + C_1 y}{(a + 2by + cy^2)^{3/2}} \quad (53)$$

со следующими значениями для C_0, C_1 :

$$\left. \begin{aligned} C_0(ac - b^2) &= A_0 b - A_1 a = A_1 B_0^2, \\ C_1(ac - b^2) &= A_0 c - A_1 b = A_0 B_0^2. \end{aligned} \right\} \quad (53a)$$

Чтобы перейти от неопределённого интеграла (53) к определённому, заметим, что при $y = \pm 1$, согласно (51), $B = 0$ и $A = A_0 \pm A_1$; таким образом, в силу (51г), $(a + 2by + cy^2)^{1/2} = A_0 \pm A_1$. Поэтому получаем из (53) в качестве значения для (52):

$$\int \frac{d\omega}{P^4} = 2\pi \left(\frac{C_0 + C_1}{A_0 + A_1} + \frac{C_0 - C_1}{A_0 - A_1} \right) = \frac{4\pi B_0^2}{ac - b^2}, \quad (54)$$

последнее — вследствие (53a). Но вследствие (51г)

$$ac - b^2 = B_0^2 (A_0^2 - A_1^2 - B_0^2) \quad (54a)$$

и, согласно (51в),

$$A_1^2 + B_0^2 = 4p_2^2 q \quad \text{с} \quad q = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + p_1^2 - 2\frac{h\nu}{c} p_1 \cos \vartheta,$$

$$A_0^2 = (p_2^2 + q)^2, \quad \text{следовательно,} \quad A_0^2 - A_1^2 - B_0^2 = (p_2^2 - q)^2.$$

По (54) и (54a) имеем:

$$\int \frac{d\omega}{P^4} = \frac{4\pi}{(p_2^2 - q)^2}. \quad (55)$$

Из формул, связывающих p с энергией, легко следует:

$$p_2^2 - q = -2 \frac{\hbar\nu}{c^2} (E_1 - cp_1 \cos \theta) = -\frac{2\hbar\nu}{c^2} \omega_1.$$

Таким образом,

$$\int \frac{d\omega}{P^4} = \frac{\pi c^4}{(\hbar\nu)^2 \omega_1^2}. \quad (55a)$$

Рассчитанный здесь интеграл дал очень простой конечный результат без использования предположения о больших энергиях. Для других членов (49а) это не так. Поэтому мы укажем только результат и притом лишь для простого случая

$$(E_1, E_2) \gg E_0.$$

Введём обозначение

$$M = \frac{4E_1^2 E_2^2}{E_0^2 (\hbar\nu)^2}. \quad (56)$$

Тогда получаем:

$$\left. \begin{aligned} \int \frac{[p_2 n]^2 d\omega}{\omega_2^2 P^4} &= \frac{\pi c^4 p_2^2 \sin^2 \theta}{(\hbar\nu)^2 \omega_1^2} + \frac{\pi c^2}{E_1^2} \left(\frac{3E_0^2 \sin^2 \theta}{2\omega_1^4} - \frac{1}{\omega_1^2} \right) (2 - \ln M), \\ \int \frac{([p_1 n][p_2 n]) d\omega}{\omega_2 P^4} &= \frac{\pi c^2 (E_1 E_2 - E_0^2) \sin^2 \theta}{(\hbar\nu)^2 \omega_1^3} - \frac{\pi c^3 E_0^2 \sin^2 \theta}{2E_1 E_2 \omega_1^3} \ln M, \\ \int \frac{[P n]^2 d\omega}{\omega_2 P^4} &= \frac{\pi c^2}{E_1 E_2 \omega_1} (\ln M - 1). \end{aligned} \right\} \quad (56a)$$

По сравнению с этими слагаемыми можем пренебречь интегралами

$$\int \frac{d\omega}{P^3}, \quad \int \frac{[p_2 n]^2 d\omega}{\omega_2^2 P^2}, \quad \int \frac{[p_1 n][p_2 n] d\omega}{\omega_2^2 P^2}.$$

Сумма всех членов, относящихся к интегральному процессу с помощью соотношений, существующих между p_1 , E_1 , p_2 , E_2 и ν , даёт:

$$\int \bar{H} d\omega = 2\pi c^2 \left\{ \frac{4E_0^2 \sin^2 \theta}{\omega_1^4} - \frac{(E_1 + E_2)^2}{E_1 E_2 \omega_1^2} + \left[-\frac{E_0^2 \sin^2 \theta}{\omega_1^4} + \frac{E_1^2 + E_2^2}{E_1 E_2 \omega_1^2} \right] \ln M \right\}. \quad (57)$$

Здесь множитель $\sin^2 \theta$ напоминает нерелятивистскую теорию тормозного излучения в уравнении (39), а знаменатели ω_1^2 и ω_1^4 напоминают опережение в § 6. В самом деле, ведь (m — движущаяся масса)

$$\omega_1 = E_1 - cp_1 \cos \theta = mc^2 - mv_1 c \cos \theta = mc^2 (1 - \beta_1 \cos \theta). \quad (58)$$

Ж. Формула Бете—Гайтлера для полного излучения. После того как мы установили угловое распределение интенсивности, мы хотим ещё определять полную интенсивность излучения. Для этого вычислим

$$\int \bar{H} d\Omega; \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Удобнее вместо θ в качестве переменной интегрирования использовать величину ω_1 . По (58) имеем:

$$\cos \theta = \frac{E_1 - \omega_1}{cp_1}, \quad \sin \theta d\theta = \frac{d\omega_1}{cp_1}. \quad (59)$$

Принимая во внимание, что азимут φ в H не входит, получаем:

$$\int \bar{H} d\Omega = \frac{2\pi}{cp_1} \int \bar{H} d\omega_1. \quad (60)$$

Вычисление этого интеграла будет очень простым, если в числителе (57) $\sin^2 \vartheta$ разложить в ряд в предположении, что $\vartheta \ll 1$:

$$\sin^2 \vartheta = (1 + \cos \vartheta)(1 - \cos \vartheta) \sim 2 \left(1 - \frac{E_1 - \omega_1}{cp_1}\right) \quad (60a)$$

[ср. (59)]. Однако вследствие $E_0 \ll E_1$

$$cp_1 - E_1 = E_1 \left\{ \left(1 - \frac{E_0^2}{E_1^2}\right)^{1/2} - 1 \right\} \sim -\frac{E_0^2}{2E_1}, \quad (60б)$$

поэтому, согласно (60a),

$$\sin^2 \vartheta \sim \frac{2}{cp_1} \left(\omega_1 - \frac{E_0^2}{2E_1} \right),$$

и так как по (60б) в первом приближении $cp_1 \sim E_1$, то

$$\sin^2 \vartheta = \frac{2}{E_1} \left(\omega_1 - \frac{E_0^2}{2E_1} \right). \quad (60в)$$

Тогда в (60) встречаются только интегралы

$$\int \frac{d\omega_1}{\omega_1^4}, \quad \int \frac{d\omega_1}{\omega_1^3}, \quad \int \frac{d\omega_1}{\omega_1^2}, \quad (61)$$

которые берутся в пределах от

$$\vartheta = 0, \quad \omega_1 = E_1 - cp_1 \sim \frac{E_0^2}{2E_1}$$

до

$$\vartheta = \pi, \quad \omega_1 = E_1 + cp_1 \sim 2E_1.$$

Так как второй предел велик по сравнению с первым, то величина интеграла определяется только последним. Согласно этому получаем, таким образом, для (61) ряд

$$\frac{8}{3} \frac{E_1^8}{E_0^8}, \quad \frac{2E_1^2}{E_0^4}, \quad \frac{2E_1}{E_0^2}. \quad (61a)$$

Отсюда следует по (57) и (60):

$$\int \bar{H} d\Omega = \frac{4\pi^2 c^2}{E_1} (A_1 + A_2 \ln M),$$

$$A_2 = \frac{2}{E_0^2 E_2} \left(-\frac{2}{3} E_1 E_2 + E_1^2 + E_2^2 \right) = \frac{2}{E_0^2 E_2} \left(\frac{4}{3} E_1 E_2 + (h\nu)^2 \right) = -A_1.$$

Поэтому, если ещё внесём M из (56), то

$$\int \bar{H} d\Omega = \frac{16\pi^2 c^2}{E_1 E_2 E_0^2} \left((h\nu)^2 + \frac{4}{3} E_1 E_2 \right) \left(\ln \frac{2E_1 E_2}{E_0 h\nu} - \frac{1}{2} \right). \quad (62)$$

Теперь следует из (49) для полной интенсивности, если объединить все постоянные множители:

$$\bar{J}_\nu = \int \int J_\nu d\omega d\Omega = 4\pi k \left(\frac{e^2 Z}{E_0} \right)^2 \frac{(h\nu)^2 + \frac{4}{3} E_1 E_2}{E_1^2} \left(\ln \frac{2E_1 E_2}{E_0 h\nu} - \frac{1}{2} \right). \quad (63)$$

Это выражение было также впервые указано Заутером [см. уравнение (19) его работы]. Он заложил основу для работы Бете и Гайтлера (см. примечание на стр. 425), имеющей фундаментальное значение в теории космических лучей.

У Бете и Гайтлера речь идёт о полном торможении, т. е. об излучении, проинтегрированном по всем частотам:

$$J = \int_0^{\nu_0} \bar{J}_\nu d\nu. \quad (64)$$

Здесь $\nu_0 = E_1/h$ — граничная частота тормозного спектра. Соответствующей переменной интегрирования является E_2 , в то время как жёсткость падающего излучения будем считать при интегрировании постоянной. Следовательно, имеем:

$$J = \int_0^{E_1} \bar{J}_\nu \frac{dE_2}{h} = C \{C_1 R_1 + R_2\}. \quad (64a)$$

Введённые здесь величины C , C_1 , R_1 , R согласно (63) имеют значение:

$$C = \frac{4\alpha}{E_1^2} \left(\frac{e^2 Z}{E_0} \right)^2, \quad C_1 = \ln \frac{2E_1}{E_0} - \frac{1}{2}, \quad R_1 = \int_0^{E_1} \left(E_1^2 - \frac{2}{3} E_1 E_2 + E_2^2 \right) dE_2, \quad (64b)$$

$$R_2 = \int_0^{E_1} \left(E_1^2 - \frac{2}{3} E_1 E_2 + E_2^2 \right) \ln \frac{E_2}{E_1 - E_2} dE_2.$$

Вычисляем непосредственно

$$R_1 = E_1^3. \quad (64в)$$

Легко убеждаемся далее, что входящий в R_2 член с множителем E_1^2 исчезает. Оставшаяся часть R_2 преобразуется интегрированием по частям и даёт:

$$R_2 = -\frac{1}{3} E_1^2 (E_1 - E_2) \ln \frac{E_2}{E_1 - E_2} \Big|_0^{E_1} + \frac{E_1}{3} \int_0^{E_1} E_2 dE_2 = \frac{E_1^2}{6}. \quad (64г)$$

Поэтому имеем, согласно (64а, б, в, г),

$$J = 4\alpha \left(\frac{e^2 Z}{E_0} \right)^2 E_1 \left(\ln \frac{2E_1}{E_0} - \frac{1}{3} \right). \quad (65)$$

Если рассмотрим падающую частицу с энергией E_1 в среде, содержащей N атомов с атомным номером Z на каждый $см^3$, то потеря энергии частицы — ΔE_1 на пути Δx выразится так:

$$\frac{\Delta E_1}{\Delta x} = NJ. \quad (65a)$$

Формулы (65) и (65а) представляют *формулу Бете — Гайтлера* для рассмотренного особого случая, когда можно пренебречь эффектом экранирования заряда ядра Z окружающей электронной оболочкой¹⁾.

¹⁾ Указанные формулы при этом ограничены были уже несколько ранее сообщены Гайтлером и Заутером [Nature 132, 892 (1933)]. Значение работы Бете — Гайтлера состоит в том, что не только было численно определено влияние экранирования, но также в том, что были количественно сравнены вероятности потери энергии на излучение и на ионизацию.

3. Обсуждение формулы Бете—Гайтлера. Величина $e^2/E_0 = e^2/m_0c^2$, называемая «радиусом электрона», имеет размерность *см*. Поэтому J имеет размерность $\text{эрг} \cdot \text{см}^2$. Так как N имеет размерность см^{-2} , то размерность правой части (65а) оказывается, как и должно быть, равной $\text{эрг}/\text{см}$. Определённую посредством (65) площадь

$$Q = \alpha \left(\frac{e^2 Z}{E_0} \right)^2 \quad (65б)$$

можно рассматривать по порядку величины как «эффективное поперечное сечение ядра Z для процесса тормозного излучения».

С возрастанием жёсткости E_1 J увеличивается не линейно, а несколько сильнее, а именно, согласно (65):

$$\frac{dJ}{dE_1} = 4Q \left(\frac{2}{3} + \ln \frac{2E_1}{E_0} \right). \quad (65в)$$

Мы увидим на рис. 37, что этот подъём в результате экранирования значительно сглаживается и тем сильнее, чем больше Z .

В нашем расчёте величина αZ предполагалась малой по сравнению с единицей. Следовательно, наша формула (65) справедлива прежде всего для лёгких ядер с $Z \ll 137$. В случае *тяжёлых* ядер Егером¹⁾ сделан численный расчёт, показавший, что для энергий, сравнимых или в несколько раз больших энергии покоя E_0 , результат во много раз отличается от значения, даваемого формулой (65). Следует предположить, что для гораздо больших энергий, к которым, собственно говоря, и относятся наши формулы, эти отклонения для тяжёлых ядер также исчезнут.

Мы хотим также сравнить рассмотренные выше потери энергии на *излучение* с потерями энергии при *столкновении электронов*. Оказывается, что для медленных электронов ($v \ll c$) процессы столкновения являются определяющими, но для быстрых электронов ($v \sim c$) их роль мала по сравнению с потерями энергии на излучение. Причиной этого является следующее: при столкновении с атомом электрон (за счёт возбуждения или ионизации атома) теряет энергию порядка ионизационного потенциала. Эта величина при энергиях $E_1 \gg E_0$ незначительна. Напротив, в процессах излучения встречаются потери энергии порядка величины начальной энергии E_1 . Мы знаем из § 3, что при средней жёсткости падающего излучения интенсивность в сплошном спектре изменяется почти равномерно вплоть до коротковолновой границы. То же самое относится в большой степени и к рассмотренному теперь очень жёсткому излучению. Следовательно, большие потери энергии при излучении отнюдь не являются малозероятными²⁾. Они должны, наконец, с возрастанием энергии E_1 превышать малые потери энергии при ионизации, несмотря на большое число актов столкновения.

По Бете и Гайтлеру энергия, для которой та и другая потери равны, лежит при

$$E_1 = \frac{1600E_0}{Z}. \quad (66)$$

Причина появления знаменателя понятна: потеря энергии при излучении пропорциональна, как мы видели в (65), Z^2 ; потеря энергии при столкновении, так как дело идёт о складывающемся влиянии отдельных электронных обо-

¹⁾ J. C. Jaeger, On Bremsstrahlung, Nature 140, 108 (1937).

²⁾ В работе Бете и Клармана [Bothe u. Klarman, Zs. f. Phys. 101, 489 (1936)] найдено, что для вторичных электронов от γ -лучей ($E_1 \sim 3E_0$) большие потери энергии даже чаще встречаются, чем надо ожидать по Бете.—Гайтлеру.

лочек, пропорциональна Z ; (66) даёт для свинца и воздуха в качестве «критических значений» $E_1 = 10$ и 100 Мэв соответственно.

Мы должны теперь сделать ещё некоторые качественные указания о роли экранирования, благодаря которым также будут изменены вышеуказанные числовые значения.

Мы исходим из переданного ядру импульса отдачи P , который можно построить из двух, почти совпадающих по направлению векторов p_1 и $p_2 + \frac{h\nu}{c} n$. Угол между ними (см. стр. 463) убывает с возрастанием E_1 и имеет величину (так же как углы α , θ на рис. 36) порядка E_0/E_1 . Следовательно, имеем:

$$P \sim p_1 \frac{E_0}{E_1} \sim \frac{E_0}{c} \quad (\text{для } E_1 \gg E_0). \quad (67)$$

Следовательно, импульс отдачи P растёт с увеличением E_1 не до любой величины, а имеет верхнюю границу

$$P_{\text{макс}} \sim m_0 c. \quad (67a)$$

Этому максимальному P соответствует минимальное расстояние r , при котором происходит передача импульса P . Для нашего исходного интеграла [ср., например, (9)] область переменной интегрирования, дающая основной вклад, простирается приблизительно (подробности см. у Бете и Гайтлера, § 4) до $(Kr) \sim Kr \sim 1$, следовательно,

$$r \sim \frac{1}{K} = \frac{\hbar}{P}. \quad (67б)$$

Из (67a) поэтому следует:

$$r_{\text{мин}} \sim \frac{\hbar}{P_{\text{макс}}} \sim \frac{\hbar}{m_0 c} = \frac{1}{2\pi} \lambda_c. \quad (67в)$$

С другой стороны, существует минимальный импульс отдачи, который был бы передан ядру в том случае, если бы векторы p_1 , p_2 и $\frac{h\nu}{c}$ точно совпадали по направлению. Минимальный импульс отдачи легко найти из $P = p_1 - p_2 - \frac{h\nu}{c}$, разложив по степеням E_0/E_1 и E_0/E_2 :

$$P_{\text{мин}} = \frac{E_0}{c} \cdot \frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{E_2} - \frac{1}{E_1} \right) \sim P_{\text{макс}} \frac{h\nu E_0}{2E_1 E_2}. \quad (67г)$$

Соответствующий радиус действия, согласно (67б),

$$r_{\text{макс}} \sim r_{\text{мин}} \cdot \frac{2E_1 E_2}{h\nu E_0}. \quad (67д)$$

Таким образом, мы имеем следующее замечательное обстоятельство: в релятивистской области расчёт с голым ядром тем более обоснован, чем выше энергия электрона, т. е. при увеличении энергии процесс излучения происходит на все меньшем расстоянии от ядра. Причина этого состоит в следующем: с возрастанием импульса становится больше также импульс отдачи ядра, следовательно, необходимо все более сильное взаимодействие с атомным ядром. Но в релятивистской области импульс отдачи ядра растёт с энергией не до любой величины, а имеет предел порядка $m_0 c$ [уравнение (67a)]. Это означает, что расстояние между электроном и ядром, играющее главную роль в процессе излучения, отнюдь не становится всё меньше и меньше, а имеет нижнюю границу порядка величины комптоновской длины волны

[уравнение (67в)]. Наряду с импульсом отдачи ядра порядка m_0c также появляются меньшие импульсы отдачи. Минимальный импульс отдачи [уравнение (67г)] по порядку величины в E_0/E_1 меньше максимального и, следовательно, тем меньше, чем больше энергия. Это означает, что при возрастании энергии размеры области, в которой в основном происходит процесс торможения, увеличиваются от комптоновской длины волны до всё больших величин.

Это наглядно поясняется рис. 37, взятым из работы Бете и Гайтлера. По оси абсцисс отложен $\ln E_1$, по оси ординат — величина, не имеющая специального названия:

$$\Phi = 4 \ln \frac{2E_1}{E_0} - \frac{4}{3} - \dots,$$

где многоточием обозначено влияние экранирования. Φ связано с величиной J

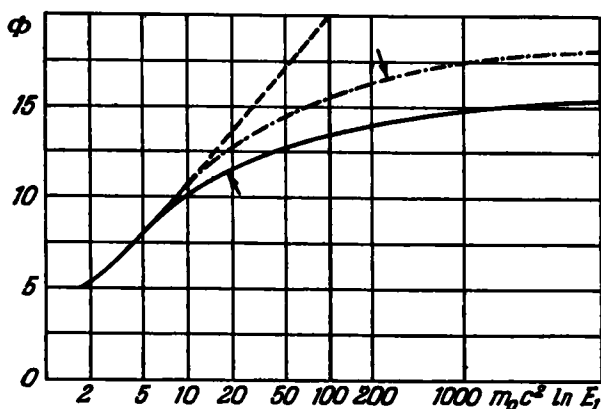


Рис. 37. Влияние экранирования по Бете и Гайтлеру для Pb (—) и H_2O (-·-·-); кривая --- соответствует случаю пренебрежения экранированием. Числа, поставленные на оси абсцисс, — значения E_1 в единицах $E_0 = m_0c^2$. Стрелки показывают те точки, выше которых роль соударений меньше, чем роль тормозного излучения.

в (65), исправленной для учёта экранирования, и с эффективным поперечным сечением Q в (65г) следующим образом:

$$J = QE_1\Phi. \quad (68)$$

Как видно, влияние экранирования значительно, причём для Pb больше, чем для H_2O . В соответствии с уравнением (66) для Pb преобладание излучения над ионизационными потерями наступает раньше, чем для H_2O .

При сравнении с наблюдениями Андерсона над электронами космических лучей с энергией в 300 Мэв Бете и Гайтлер считали, что их формула дала бы гораздо более высокие потери, и брали в качестве предполагаемой действительной границы энергию, равную $137E_0$. К противоположному выводу привели уточнённые опыты и расчёты Андерсона и др., в настоящее время всеми признанные: формула Бете — Гайтлера справедлива для *любых скоростей*. Но в спектре космических лучей, как это кажется у поверхности земли, электроны с энергией свыше 200 Мэв играют довольно незначительную роль. Здесь скорее преобладают «тяжёлые электроны», или «мезо-

троны», возможность существования которых была впервые теоретически предсказана Юкавой¹⁾. Их масса составляет от 50 до 200 масс электрона. (Возможно ли что их масса равна 136 массам электрона в соответствии с постулированными Эддингтоном элементарными частицами? Или $2 \cdot 137$ массам электрона по теории Борна?) Их излучение очень незначительно по сравнению с излучением электронов (ср. § 8, пункт Б). Ниже 200 Мэв на поверхности земли преобладают лёгкие электроны, которые получают при радиоактивном распаде тяжёлых электронов (при одновременном испускании нейтрино).

§ 8. СПЕЦИАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ТОРМОЖЕНИИ ПРОТОНОВ. АСТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

А. Мягкие рентгеновские лучи. Будем считать в противоположность предыдущим параграфам скорость падающего электрона настолько малой, что $\beta_1 \ll \alpha Z$. Тогда будет $|n_1| \gg 1$ и подавно $|n_2| \gg 1$. Полагая, как в дополнении 16, уравнение (28):

$$n_2 = -in, \quad n_1 = -ipn, \quad 0 < \rho < 1, \quad n \rightarrow \infty. \quad (1)$$

Так как вопрос о запаздывании отпадает, то мы возвращаемся к методу матричных элементов в § 2. Используем обозначения P и Q из дополнения 16, уравнение (316), и получим по (2.27):

$$|M_\omega|^2 = \frac{|C|^2}{(1-x)^2} |P|^2, \quad \left\{ \begin{array}{l} |M_y|^2 \\ |M_x|^2 \end{array} \right\} = \frac{|C|^2}{(1-x)^2} \left\{ \begin{array}{l} \cos^2 \beta \\ \sin^2 \beta \end{array} \right\} \sin^2 \alpha |Q|^2. \quad (2)$$

Здесь, согласно (2.26а) и (2.166),

$$|C| = 16\pi e^{-\pi\rho n} \left(\frac{a}{Z}\right)^4 \frac{n^{4\rho}}{(1+\rho)^2(1-\rho)^4}, \quad x = \frac{-4\rho}{(1-\rho)^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (2a)$$

В выражении для x положим $\sin \frac{\alpha}{2} = 1$, следовательно, $\alpha = \pi$ (точно так же, как в дополнении 16, уравнение (36): стоящий там угол $\alpha' = \pi - \alpha$ считается малым). Физическим основанием для этого является следующее: при очень незначительной скорости падающего электрона лишь тогда надо ожидать значительного излучения, когда путь сильно искривляется, и потому после торможения угол с первоначальным направлением приблизительно равен π . То же самое показывается математически: при последующем интегрировании по α лишь малые значения α дают заметные вклады в интеграл. Из уравнения (2a) тогда приближённо получаем:

$$1 - x = \left(\frac{1+\rho}{1-\rho}\right)^2. \quad (26)$$

С помощью величин $|P|^2$ и $|Q|^2$ из дополнения 16, уравнение (41), имеем, согласно (2), если здесь также примем, что $\alpha = \pi - \alpha' \sim \pi$, и соответственно этому выразим $\sin^2 \alpha$ через α'^2 :

$$\left. \begin{array}{l} |M_\omega|^2 \\ |M_y|^2 \\ |M_x|^2 \end{array} \right\} = \frac{4\pi^2}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^8 \frac{n^{10\rho}}{(1-\rho)^2(1+\rho)^8} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ \cos^2 \beta \\ \sin^2 \beta \end{array} \right\} \alpha'^4 \left\{ \begin{array}{l} e^{5i\pi/6} H_{1/2}^{(1)}(is) \\ e^{2i\pi/3} H_{1/2}^{(1)}(is) \\ e^{2i\pi/3} H_{1/2}^{(1)}(is) \end{array} \right\}. \quad (3)$$

¹⁾ H. Yukawa, Physico-Mathem. Soc. of Japan 17, 48 (1935); 19, 1084 (1937); 20, 319 (1938).

Входящий сюда символ s имеет согласно дополнению 16, уравнение (39а), следующий смысл:

$$s = \frac{n\alpha'^8}{6} \frac{\rho(1-\rho)}{(1+\rho)^2}. \quad (3a)$$

Чтобы получить интенсивность и поляризацию излучения, надо выражение (3) проинтегрировать по

$$d\omega = \sin \alpha \, d\alpha \, d\beta = -\sin \alpha' \, d\alpha' \, d\beta' \quad (4)$$

(некогерентное наложение элементарных процессов). Из выражения (3а) для s сразу заключаем, что только малые значения для α' надо принимать во внимание. При конечных α' вследствие большого множителя n в (3а) s также будет очень велико. Но тогда функции Ганкеля $H^{(1)}(is)$ убывают, как e^{-s} . Только когда α' мало, порядка $n^{-1/2}$, имеем s конечной величины и не исчезающе малое $H^{(1)}$. Но тогда мы можем $\sin \alpha'$ в (4) выразить через α' и интегрирование по α' , которое, вообще говоря, производится от π до 0, распространить от 0 до ∞ , так как добавленная часть пути интегрирования не даёт конечного вклада в интеграл. Таким образом, из (3) получаем:

$$\int |M_x|^2 d\omega = 2\pi B K_{1/2}, \quad \int |M_y|^2 d\omega = \int |M_z|^2 d\omega = \pi B K_{1/2}, \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} K_{1/2} &= \int_0^\infty e^{5i\pi/3} \{H_{1/2}^{(1)}(is)\}^2 \alpha'^5 d\alpha', \\ K_{1/2} &= \int_0^\infty e^{4i\pi/3} \{H_{1/2}^{(1)}(is)\}^2 \alpha'^5 d\alpha', \end{aligned} \right\} \quad (5a)$$

$$B = \frac{4\pi^2}{3} \left(\frac{a}{Z}\right)^8 \frac{n^{10} \rho^{10}}{(1-\rho)^2 (1+\rho)^6}. \quad (5b)$$

Оба интеграла (5а) можно объединить в один, вводя переменную интегрирования s и считая $\rho = 2/3$ или $1/3$:

$$K_p = 12 \left[\frac{n\rho(1-\rho)}{(1+\rho)^2} \right]^{-2} e^{i\pi(p+1)} \int_0^\infty \{H_p^{(1)}(is)\}^2 s \, ds. \quad (5b)$$

Но для каждой цилиндрической функции Z справедливо представление¹⁾ с помощью неопределённого интеграла:

$$\int \{Z_p(as)\}^2 s \, ds = \frac{s^2}{2} [\{Z_p(as)\}^2 - Z_{p-1}(as) Z_{p+1}(as)]. \quad (6)$$

При применении её к (5б) с $a = i$ и $Z = H_p^{(1)}$ правая часть для верхнего предела $s = \infty$ исчезает [$H^{(1)}(is)$ имеет экспоненциальный ход, а для нижнего предела $s = 0$ принимает некоторое конечное граничное значение]. Вообще, имеем²⁾:

$$H_p^{(1)} = \frac{i}{\sin p\pi} (e^{-i p\pi} J_p - J_{-p}) \quad (6a)$$

¹⁾ Е. Янке и Ф. Эмде, Таблицы функций с формулами и кривыми, Гостехиздат, 1949, стр. 237.

²⁾ Там же, стр. 228, стр. 224.

и

$$J_p(x) \rightarrow \frac{1}{\Gamma(p+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^p \quad \text{при } x \rightarrow 0. \quad (6б)$$

Отсюда легко видеть, что первый член в правой части (6) ничего не даёт и что во втором члене как для $p = 2/3$, так и для $p = 1/3$ надо принять во внимание лишь произведение членов с множителем

$$J_{p-1} J_{-p-1},$$

которое, согласно (6б), стремится к бесконечности, как s^{-2} . Получаем, таким образом, из (6) и (6а, б):

$$e^{4\pi(p+1)} \int_0^{\infty} \{H_p^{(1)}(is)\}^2 s ds = \frac{-2}{\sin^2 p\pi \Gamma(p) \Gamma(-p)} = \frac{2p}{\pi \sin p\pi}; \quad (6в)$$

последнее получается при использовании соотношения (6) дополнения 7. Итак, согласно (5), (5б, в) и (6в):

$$\int |M_{\omega}|^2 d\omega = 4 \left\{ \int |M_y|^2 d\omega \right\} = \frac{(16\pi)^2}{3 \sqrt{3}} \left(\frac{a}{Z}\right)^8 (n\rho)^8 \frac{1}{(1-\rho^2)^4}. \quad (7)$$

Отсюда приближённо находим значение определённой в (3.4) степени деполаризации D для направления наблюдения, перпендикулярного к направлению падения x . Уравнение (7) даёт непосредственно:

$$D = \frac{1}{4}, \quad (7а)$$

D , следовательно, не зависит от ρ , т. е. от положения в сплошном спектре. Поэтому можно было использовать рис. 30 (коротковолновая граница; ср. асимптоту нарисованной там кривой) и рис. 31 [полный спектр; ср. пунктирную предельную кривую¹⁾].

Затем рассмотрим вопрос о ходе интенсивности в сплошном спектре, причём предполагаем направление наблюдения перпендикулярным, например, к оси y . Имеем тогда, присоединяя нормировочный множитель N :

$$J_y = N \int (|M_x|^2 + |M_y|^2) d\omega. \quad (8)$$

Следовательно, согласно (7),

$$J_y = \frac{5}{4} N \frac{(16\pi)^2}{3 \sqrt{3}} \left(\frac{a}{Z}\right)^8 \frac{n^2 \rho^8}{(1-\rho^2)^4}. \quad (8а)$$

Получающийся при нормировке собственных функций множитель N имеет, согласно (3.16а), величину

$$N = \frac{e^2}{2c^3 r^2} \left(\frac{h}{m}\right)^2 \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{(k_1^2 - k_2^2)^4}{(4\pi)^2 k_1^2}. \quad (8б)$$

¹⁾ Эта кривая проходит на рис. 31 в виде прямой линии вплоть до длинноволновой границы $\frac{k_2}{k_1} = 1$, которой в нашей теперешней ρ -шкале соответствует $\rho = 1$. Для $\rho = 1$ наше приближение будет неточным, как явствует из смысла s в (3а). Подъём пунктирной линии на рис. 31 при $\rho = 1$, следовательно, согласуется с (7а).

Здесь уже прежние знаменатели $1 - \exp(-2\pi n_1)$ и $1 - \exp(-2\pi n_2)$ вследствие $n \rightarrow \infty$ заменяются на единицу. В числителе (8б), в силу связи k_1, k_2 с n_1, n_2 или с n, ρ , напишем:

$$k_1^2 - k_2^2 = \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{1 - \rho^2}{n^2 \rho^2}. \quad (8в)$$

Кроме того, в знаменателе имеется величина

$$k_1 = \frac{2\pi m v_1}{h}. \quad (8г)$$

Благодаря этому (8б) переходит в

$$N = \frac{2e^2}{(4\pi)^5 c^3 r^2} \left(\frac{h}{m}\right)^4 \left(\frac{Z}{a}\right)^{10} \frac{(1 - \rho^2)^4}{n^8 \rho^8 v_1^2}. \quad (8д)$$

Сравнение с (8а) уже показывает, что в J_1 выпал множитель, зависящий от ρ и n ; J_1 , следовательно, будет постоянно вдоль всего сплошного спектра. На коротковолновой границе, $v = v_g$ имеем, как и ранее, быстрое падение до нуля; на длинноволновой границе, $v = 0$, изображённый на рис. 32 подъём переходит в разрыв.

Подставляя (8д) и $a = h^2/4\pi^2 m e^2$ в (8а), окончательно получаем:

$$J_1 = \frac{10\pi}{3\sqrt{3}} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{(Ze^2)^2}{e^8 r^2 v_1^2}. \quad (9)$$

Характерным здесь является появление множителя v_1^2 в знаменателе. Чем *мягче* падающие катодные лучи, тем *больше* спектральная интенсивность рентгеновских лучей. Причина этого очевидна; говоря языком классической физики, более сильное искривление траекторий электрона в поле ядра приводит к более сильному излучению. Вычислим ещё сумму

$$S = \int (|M_x|^2 + |M_y|^2 + |M_z|^2) d\omega. \quad (9а)$$

Из (7) легко получаем:

$$S = \frac{(16\pi)^2}{2\sqrt{3}} \left(\frac{a}{Z}\right)^8 \frac{(n\rho)^8}{(1 - \rho^2)^4}.$$

Если воспользоваться уравнением (8в) и законом сохранения энергии

$$h\nu = (k_1^2 - k_2^2) \frac{h^2}{2m},$$

то можем также легко получить:

$$S = \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{h}{m\nu}\right)^4. \quad (9б)$$

В историческом отношении должно быть добавлено следующее: Крамерс в 1923 г. (следовательно, до волновой механики; см. примечание на стр. 424) рассчитал сплошной рентгеновский спектр на основе принципа соответствия, рассматривая излучение для гиперболической траектории и обрезая получающийся таким образом спектр для граничной частоты $\nu = \nu_g$. Его результаты совпадают с нашими выводами для *мягкого* рентгеновского излучения (даже и формально, так как им точно так же были введены функции $H_{1/2}, H_{3/2}$), но не совпадают для *жесткого* излучения¹⁾. Причина этого понятна:

¹⁾ A. W. Maue, Ann. d. Phys. 18, 161 (1932).

предельный случай мягкого рентгеновского излучения в наших обозначениях выражается посредством

$$|n_1| = \frac{\alpha Z}{\beta} \rightarrow \infty.$$

Он будет реализоваться или при $\beta \rightarrow 0$ или при $\alpha \rightarrow \infty$, вместо чего можно также сказать, что $\hbar \rightarrow 0$. Первое условие ($\beta \rightarrow 0$) соответствует нашей волномеханической точке зрения в этом параграфе. Последнее условие ($\hbar \rightarrow 0$) лежит в основе полуклассического расчёта Крамерса, в котором квант действия вводится лишь задним числом посредством обрезания для предельной величины кванта. Напоминаем также о следующем обстоятельстве: принцип соответствия требует предельного случая больших квантовых чисел n в дискретном спектре. Однако наши мнимые параметры n_1 , n_2 , согласно своему определению (ср. стр. 101) имеющие на границе между континуумом и дискретным спектром действительные значения, при $n \rightarrow \infty$ переходят, очевидно, в мнимые. Принцип соответствия справедлив также для этих мнимых n , если они достаточно велики, следовательно, — для достаточно мягкого рентгеновского излучения.

Б. Торможение протонов. Вопрос о получении рентгеновских лучей с помощью протонных лучей (водородные каналовые лучи) связан с предшествующим, поскольку при одинаковом напряжении на трубке скорость каналовых лучей в отношении $\sqrt{m/m_H}$ меньше, чем скорость катодных лучей. *Напряжение* является, правда, мерилем жёсткости получающегося тормозного излучения; однако характер собственной функции будет определяться величиной

$$|n| = \frac{\alpha Z}{\beta}, \quad \beta = \frac{v}{c},$$

следовательно, *скоростью*.

При одинаковых скоростях протонные собственные функции получаются из электронных с помощью преобразования подобия. Так как эти собственные функции кроме параметра n , который мы должны полагать в обоих случаях одним и тем же, также зависят от аргумента

$$kr = \frac{v}{\hbar} \left\{ \frac{m_H}{m} \right\} r,$$

то мы найдём такое же функциональное выражение для случая протонов на расстояниях r , в $\frac{m}{m_H}$ раз *меньших*, чем для случая электронов. Основная часть излучения происходит, следовательно, в случае протонов ближе от ядра, чем в случае электронов, или, выражаясь языком классической физики, чтобы испытать значительное отклонение от своего пути, протон при одинаковых скоростях должен пролететь гораздо ближе к ядру, чем электрон. Это означает уменьшение эффективного поперечного сечения и потому уменьшение тормозного излучения.

Количественно получаем из уравнения (9), что при переходе от электронного к протонному случаю надо присоединить множитель, учитывающий различие масс:

$$G_1 = \left(\frac{m}{m_H} \right)^2 = \left(\frac{1}{1837} \right)^2. \quad (10)$$

Однако наряду с этим выступает зарядный эффект, который, как подчеркивается Шерцером¹⁾, даже важнее эффекта различия масс. Ведь положительный заряд протона означает отталкивание, а не притяжение к ядру, как для электрона. При этом изменяется знак потенциальной энергии, или, как можно также сказать, знак Z . Однако с Z меняет свой знак также n . Следствием этого является то, что в нормировочном множителе [уравнение (8б)] знаменатель

$$(1 - e^{-2\pi i n_1})(1 - e^{-2\pi i n_2})$$

нельзя больше считать равным единице; скорее его следует приравнять величине

$$(1 - e^{2\pi i |n_1|})(1 - e^{2\pi i |n_2|}) \sim e^{2\pi i (|n_1| + |n_2|)}. \quad (11)$$

Появляется, однако, ещё другой множитель, а именно экспоненциальный множитель при расчёте матричного элемента. В выражении для $|C|$ [уравнение (2а)] имеется множитель $e^{-\pi p n}$, который теперь при изменении знака n переходит в $e^{+\pi p n}$. С другой стороны, в выражениях для $|P|^2$, $|Q|^2$ [уравнение (41) из дополнения 1б] фигурирует множитель $e^{+2\pi p n}$, который в случае электронов как раз сокращается с экспоненциальным множителем, возникающим от $|C|^2$. В случае протонов дело обстоит иначе. Названный множитель $e^{+2\pi p n}$ возникает в результате применения метода перевала, и так как из двух [уравнение (33) дополнения 1б] точек перевала мы должны, конечно, выбрать ту, которой соответствует более крутой подъём, а именно в случае протонов точку с отрицательным знаком при l , то в случае протонов в получающемся множителе остаётся тот же знак. Принимая во внимание ещё множитель, возникающий от $|C|^2$, получаем:

$$e^{+2\pi p n} e^{+2\pi p n} = e^{4\pi i |n_1|}. \quad (12)$$

Частное (12) и (11) даёт теперь в общем итоге в качестве зарядного эффекта:

$$G_2 = e^{2\pi i (|n_1| - |n_2|)} = e^{-2\pi n (1-p)}. \quad (13)$$

Имеем, следовательно, дополнительное уменьшение интенсивности излучения по сравнению со случаем электронов, которое вследствие его экспоненциального характера значительно превышает прежнее (исключая длинноволновую границу $p = 1$). Отсюда становится ясным, почему при бесчисленных опытах с водородными каналовыми лучами никогда не наблюдалось рентгеновское излучение²⁾.

Интересным является также замечание Шерцера о движении ядра, которым можно было пренебречь для случая электронов, но которое надо принять во внимание для случая протонов. Следствием этого является то, что e/m в уравнении (9) выразится не через e/m_H , как в (10), а скорее через

$$\frac{e}{m_H} - \frac{Ze}{m_A}, \quad (14)$$

где вычитаемое — удельный заряд бомбардируемого ядра. В самом деле, поскольку движение ядра принимается во внимание, то излучение, рассчитываемое в покоящейся системе координат, будет зависеть от ускорения обоих удельных зарядов как бомбардирующего, так и бомбардируемого. Тогда, по крайней мере для более лёгких ядер с $m_A \sim 2Zm_H$, выражение (14) при-

¹⁾ Работе Ann. d. Phys. 13, 137 (1932) мы следуем во всём этом разделе: особенно изображение нашего множителя G_2 на рис. 1 в этой работе.

²⁾ H. A. Barton, Journ. Franklin Inst. 209, № 1 (1930).

ближенно будет равно

$$\frac{1}{2} \frac{e}{m_H},$$

так что множитель G_1 в (10), уменьшающий излучение, уменьшится ещё в четыре раза.

Равным образом получается, что для α -частиц, удельный заряд которых составляет половину удельного заряда протона, при отклонении не слишком тяжёлыми атомами вообще не может иметь места никакое (дипольное) излучение.

В. Астрофизические приложения. В то время как старая теория газовых шаров изучала равновесие между силами тяготения и тепловым давлением, современная теория по примеру Шварцшильда должна в качестве определяющего фактора строения звёзд принять во внимание давление излучения. Одновременно становится ясным решающее значение излучения для перехода энергии изнутри на поверхность звезды (радиационное, а не конвекционное равновесие). Максимум интенсивности теплового излучения лежит при температуре солнца (около 5000°K на поверхности) в видимой области спектра, а для самых горячих A - и B -звёзд — в области коротковолнового ультрафиолетового света. В связи с этим для астрофизики является существенным изучение эмиссии и абсорбции этого излучения звёздной материей. Истинные или фотоэлектрические коэффициенты поглощения рентгеновского излучения даны в гл. VI, § 5 общей формулой, представленной в виде суммы квадратов [см. выше уравнение (9a)], которую мы можем экстраполировать в ультрафиолетовую область. Мы считали, что при фотоэффekte происходит переход атома с дискретного уровня (например, основное состояние) в область сплошного спектра и поглощается один квант света $h\nu$. Но формула (VI.5.28) описывает также переход с начального уровня, расположенного в сплошном спектре, на конечный уровень в сплошном спектре, если только в S будут представлены собственные функции, соответствующие этому переходу. Но это значение S мы знаем из вышеупомянутого уравнения (9б). Сумма матричных элементов не изменится от того, рассматриваем ли мы испускание кванта $h\nu$ при переходе атома из верхнего состояния в нижнее, как это делалось в пункте А этого параграфа, или поглощение кванта $h\nu$ при переходе атома из нижнего состояния в верхнее, что соответствует постановке вопроса в случае фотоэффекта. Следовательно, комбинируя (9б) с (VI.5.28), мы получаем, учтя необходимый нормировочный множитель N^2 :

$$\mu_{\text{ат}} = \frac{8\pi^3 e^2 \nu}{3c} \cdot \frac{N^2}{2\sqrt{3}\pi^2} \left(\frac{h}{m\nu}\right)^4. \quad (15)$$

Нормировочный множитель N^2 связан с нормировочным множителем верхнего состояния атома (1) и нижнего (2) формулой

$$N^2 = N_1^2 N_2^2. \quad (16)$$

Выражение для N^2 можно получить непосредственно из (VI.5.5б), вводя упрощающее условие для мягкого излучения ($|n_1| \rightarrow \infty$):

$$N_1^2 = \frac{|n_1| m k_1}{(2\pi)^2 \hbar^2}. \quad (16a)$$

Мы пронормировали этим способом верхнее состояние 1 (как на стр. 39б) на интервал энергии $\Delta W = 1$ и на единицу телесного угла падающего излучения.

С другой стороны, состояние 2 (начальное состояние при поглощении) мы нормируем на равную единице плотность наличных электронов. Из приведённого в гл. II, § 9, стр. 119 сравнения с плоской волной $e^{i(kr)}$, которая как раз соответствует единичной плотности, следует тогда для мягкого излучения $|n_2| \rightarrow \infty$, так же как там в уравнении (32), но с $N_0 = 1$:

$$N_2^2 = 2\pi |n_2|. \quad (166)$$

В соответствии с (16а, б) и (16) N^2 выражается в виде

$$N^2 = \frac{|n_1| |n_2| m k_1}{2\pi \hbar^2}.$$

Это же перепишем вследствие значений n_1 , n_2 и a ($n_{1,2} = \frac{Z}{ik_{1,2}a}$, $a = \frac{\hbar^2}{mc^2}$) в виде:

$$N^2 = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2 k^2} = \frac{m^3 Z^2 e^4}{2\pi \hbar^2 k^2}. \quad (17)$$

Подставляя в (15), получаем:

$$\mu_{\text{ат}} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^4}{m \hbar^2 c k_1 v^2}. \quad (18)$$

Мы выразим это в общепринятой в астрофизике форме, если подставим:

$$k_2 \hbar = m v,$$

где теперь v обозначает скорость электрона на нижнем атомном уровне непрерывного спектра, из которого он перейдёт при поглощении кванта излучения $h\nu$ на вышележащий уровень (отстоящий на $h\nu$ от первого).

Мы получаем этим способом из (18):

$$\mu_{\text{ат}} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^4}{m^3 \hbar c v^2}. \quad (19)$$

На этой формуле основывается, например¹⁾, теория процесса поглощения «континуум — континуум». Соотношение (19) дополнено по своему строению формулой для процесса поглощения «дискретное состояние — континуум».

На основе обеих формул можно исследовать радиационное равновесие в звёздных атмосферах и сравнить с наблюдаемым излучением.

¹⁾ A. Unsöld, Physik der Sternatmosphären mit besonderer Berücksichtigung der Sonne, Berlin, Julius Springer, 1938.

ГЛАВА VIII ЭФФЕКТ КОМПТОНА

§ 1. ОБЩИЙ ОБЗОР

Открыв в 1922 г. изменение длины волны рентгеновских лучей при рассеянии, Артур Комптон создал тем самым надёжную основу для гипотезы световых квантов, введённой Эйнштейном для объяснения фотоэффекта. Действительно, он смог исчерпывающе объяснить все наблюдавшиеся явления с помощью простого представления о том, что энергия и импульс первичного «фотона» распределяются между электроном отдачи, с одной стороны, и вторичным фотоном — с другой. Если направление последнего, т. е. угол рассеяния ϑ , определено на опыте, то в силу законов сохранения энергии и импульса оказываются определёнными и энергия вторичного фотона, равно как и скорость, и направление вылета электрона отдачи. Роль электронов отдачи играют в первую очередь внешние, слабо связанные электроны, которые можно рассматривать с достаточной точностью как *свободные* электроны. Как мы видели в § 7 гл. I т. I, такое представление приводит к формуле

$$\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad (1)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} \quad (\text{комптоновская длина волны})$$

или же к эквивалентной формуле

$$\frac{\nu}{\nu'} = 1 + \frac{\lambda_c}{\lambda} (1 - \cos \vartheta), \quad (2)$$

где ν означает первичную, а ν' — вторичную частоту.

Наблюдения Комптона и всех его последователей подтвердили это уравнение ¹⁾. Сомнения возникли только в отношении *интенсивности* рассеянного излучения. Здесь сначала пытались основываться на соображениях принципа соответствия (Комптон, Дебай). Решение этой задачи смогла дать только волновая механика, которая была применена к ней почти одновременно целым рядом исследователей ²⁾.

При волномеханическом рассмотрении мы будем различать, как и в предыдущей главе, три степени приближения. Первое приближение даёт *метод матричных элементов* (§ 2). Он является внутренне последовательным и поучи-

¹⁾ Незначительное отклонение от (1), найденное Россом и Киркпатриком, имеет вторичную природу и происходит из-за связанности вторичных электронов. См. по этому поводу примечания 1 и 2 на стр. 518 этой главы.

²⁾ W. Gordon, *Zs. f. Phys.* 40, 117 (1926); E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* 82, 257 (1927); O. Klein, *Zs. f. Phys.* 41, 407 (1927); G. Breit, *Phys. Rev.* 27, 362 (1926); P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* 111, 405 (1926); [См. также I. Тамм, *Zs. f. Phys.* 62, 545 (1930).]

тельным, однако не даёт правильного изменения длины волны и, поэтому, и окончательной формулы для интенсивности. При его проведении возникают своеобразные трудности со сходимостью, которые связаны с представлением о свободном электро-не. Вторую степень приближения даёт *метод электродинамических потенциалов* (§ 3). Он позволяет учитывать запаздывание испускаемого излучения и приводит к формуле Комптона для изменения длины волны и формуле Гордона для интенсивностей. Но это приближение неприменимо для самых жёстких лучей. Третий, к настоящему времени наиболее точный метод исходит из уравнения Дирака (§ 4) и приводит к знаменитой *формуле Клейна — Нишины*.

Большое упрощение, которое достигается при рассмотрении свободных электронов, состоит в том, что в этом случае возмущённые падающей волной собственные функции поддаются элементарному вычислению, так что обычное для теории возмущений разложение в ряды по невозмущённым функциям оказывается ненужным.

Задача со связанными электронами, решение которой было начато Вентцелем ¹⁾ и уточнено Валлером ²⁾, будет подробно рассмотрена в § 5. Особенно подробно будет при этом рассмотрен вопрос о соотношении между комптоновским и релеевским излучениями, т. е. между рассеяниями с изменением и без изменения длины волны. Релеевское рассеяние, как и фотоэффект, происходит только на *связанных* электронах, которые благодаря взаимодействию могут передать импульс падающего кванта ядру, и невозможно из-за законов сохранения на *свободных* электронах; напротив, комптоновское рассеяние происходит в чистом виде только на свободных электронах, наличие связи электронов превращает *комптоновскую линию* в «комптоновскую полосу». Та точка зрения, с которой мы будем рассматривать эти комптоновские полосы в § 6, приспособлена, вероятно, для того, чтобы вскрыть тончайшие проявляющиеся на опыте черты эффекта Комптона.

К доказательствам первого положения, что открытие Комптона подтверждает теорию световых квантов, относится в первую очередь установление одновременности испускания фотона и электрона отдачи. Предварительные опыты Комптона и Симона ³⁾ с камерой Вильсона подтверждают как будто это обстоятельство. Много точнее были опыты Боте и Гейгера ⁴⁾, включавшие счётное устройство с фотографической регистрацией; они также говорят в пользу временного совпадения обоих процессов. Напротив, проведённые в лаборатории Комптона опыты Шенкленда ⁵⁾ с жесткими γ -лучами говорят, казалось бы, против такого совпадения. Однако различным образом поставленные проверочные опыты не подтвердили полученного Шенклендом отрицательного результата. В особенности Боте и Мейер-Лейбниц ⁶⁾ смогли доказать количественное согласие между наблюдавшимся числом совпадений и числом совпадений, ожидавшимся из геометрии опыта. В противном случае положение оказалось бы роковым не только для первоначальной теории Комптона, но и для всей волновой механики, согласно которой законы сохранения энергии и импульса должны выполняться в каждом отдельном процессе, а не возникать в результате статистического усреднения.

¹⁾ O. Wentzel, Zs. f. Phys. 43, 1, 779 (1927).

²⁾ J. Waller, Phil. Mag. 4, 1228 (1927) и, в особенности, Zs. f. Phys. 51, 213 (1928).

³⁾ A. H. Compton & A. W. Simon, Phys. Rev. 26, 289 (1925), ср. также 25, 306 (1925).

⁴⁾ W. Bothe u. H. Geiger, Zs. f. Phys. 32, 639 (1925).

⁵⁾ R. S. Shankland, Phys. Rev. 49, 8 (1936).

⁶⁾ W. Bothe u. H. Maier-Leibnitz, Zs. f. Phys. 102, 143 (1936).

Другой теоретический вопрос, решению которого может помочь эффект Комптона, есть вопрос о том, является ли электрон частицей или волной? Общее рассмотрение процесса рассеяния приводит ¹⁾ к тому выводу, что «наилучшей классической аналогией волновомеханической картины атома является атом, построенный из отдельных, дискретных электронов, которые можно отличить друг от друга с помощью волновомеханически приписываемых им различных конфигурационных пространств».

§ 2. МЕТОД МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Представим, как и на стр. 309, падающую волну (рентгеновскую волну) векторным потенциалом:

$$A = A_y = a \cos 2\pi \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right) = \frac{a}{2} \left[e^{2\pi i \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right)} + e^{-2\pi i \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right)} \right]. \quad (1)$$

Мы выбрали ось x в направлении распространения волны, а ось y — в направлении поляризации. Амплитуду a будем считать сколь угодно малой,

В качестве собственной функции свободного, *невозмущённого* электрона выберем плоскую волну де Бройля:

$$u = \psi e^{-i\omega t}, \quad \psi = N e^{i(kr)}, \quad N = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}. \quad (2)$$

Приведённое в (2) значение нормировочного множителя мы заимствовали из (7) дополнения 8. Для частоты ω , вспоминая (1.2.27), напомним нерелятивистское выражение

$$\omega = \frac{W}{\hbar}, \quad W = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (3)$$

Мы будем использовать (2) для электрона в конечном состоянии (электрон отдачи). Электрон в начальном состоянии будем отличать индексом 0, т. е. вместо (2) напомним для него:

$$u_0 = \psi_0 e^{-i\omega_0 t}, \quad \psi_0 = N_0 e^{i(k_0 r)}, \quad N_0 = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}. \quad (4)$$

По аналогии с (3) положим:

$$\omega_0 = \frac{W_0}{\hbar}, \quad W_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2. \quad (5)$$

Перейдём теперь к *возмущённому конечному состоянию* U . Согласно (1.6.126) U находится из возмущённого уравнения:

$$\Delta U + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{e}{c} \frac{2i}{\hbar} (A \text{ grad } U). \quad (6)$$

Потенциальная энергия (энергия связи электрона в атоме) положена здесь пока равной нулю. В правой части мы можем заменить U невозмущённой собственной функцией u из (2). Поэтому, учитывая (1) и (2), мы можем переписать правую часть (6) в виде:

$$\left. \begin{aligned} & - b k_y N \left(e^{i(k'r)} e^{i(2\pi\nu - \omega)t} + e^{i(k'r)} e^{-i(2\pi\nu + \omega)t} \right), \\ & b = \frac{ea}{c\hbar}, \quad K = k - \frac{2\pi}{\lambda} e, \quad K' = k + \frac{2\pi}{\lambda} e, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

¹⁾ А. Н. Сомптон, Phys. Rev. 47, 367 (1935).

где e означает единичный вектор в направлении распространения волны (положительное направление оси x); следовательно,

$$\left. \begin{aligned} K_x &= k_x - \frac{2\pi}{\lambda}, & K_y &= k_y, & K_z &= k_z, \\ K'_x &= k_x + \frac{2\pi}{\lambda}, & K'_y &= k_y, & K'_z &= k_z. \end{aligned} \right\} \quad (7a)$$

В левой части (6) мы аналогично (V.3.7) положим:

$$U = u + w_+ e^{i(2\pi\nu - \omega)t} + w_- e^{-i(2\pi\nu + \omega)t}. \quad (8)$$

Однако для определения возмущённых членов w_{\pm} нам не понадобятся общие методы гл. V; экспоненциальный вид возмущающей функции (7) даёт возможность проинтегрировать (6) точно, положив

$$w_+ = D e^{i(\mathbf{K}r)}, \quad w_- = D' e^{i(\mathbf{K}'r)}. \quad (9)$$

Тогда подстановка в (6) и сравнение коэффициентов приводят к значениям:

$$\left. \begin{aligned} D &= \frac{bk_y N}{K^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - h\nu)}, \\ D' &= \frac{bk_y N}{K'^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W + h\nu)}. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Наконец, из (8) и (2) следует:

$$\begin{aligned} U = N e^{i(kx - \omega t)} + \frac{bk_y N}{K^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - h\nu)} e^{i(\mathbf{K}r) + i(2\pi\nu - \omega)t} + \\ + \frac{bk_y N}{K'^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W + h\nu)} e^{i(\mathbf{K}'r) - i(2\pi\nu + \omega)t} \end{aligned} \quad (11)$$

и соответственно для начального состояния U_0 , для которого мы ради удобства сразу перейдём к сопряженному выражению U_0^* :

$$\begin{aligned} U_0^* = N_0 e^{-i(kx + \omega_0 t)} + \frac{bk_{0y} N_0}{K_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W_0 - h\nu)} e^{-i(\mathbf{K}_0 r) - i(2\pi\nu - \omega_0)t} + \\ + \frac{bk_{0y} N_0}{K_0'^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W_0 + h\nu)} e^{-i(\mathbf{K}_0' r) + i(2\pi\nu + \omega_0)t}. \end{aligned} \quad (11a)$$

С помощью этих выражений мы вычислим сначала чисто формально, не заботясь о явно расходящемся виде интегралов, матричный элемент:

$$\left. \begin{aligned} M_q &= \int q U_0^* U d\tau + \text{компл.-сопр.}, \\ q &= x, y, z, \quad d\tau = dx dy dz. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Относительно добавления комплексно-сопряжённого выражения, в котором U заменяется на U^* , а U_0^* — на U_0 , см. стр. 54.

При перемножении (11) и (11a) возникнут члены с b^0 , b^1 и b^2 . Последние можно опустить как малые второго порядка. Член с b^0 нас не интересует, так как он отвечает спонтанному, а не вынужденному падающей волной переходу.

Итак, выпишем только члены с b^2 . Их можно разбить, судя по виду их временной зависимости, на две части I и II, как это ясно из схемы.

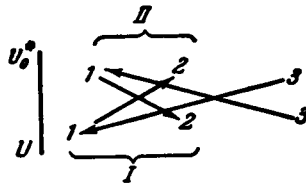


Схема вычисления стоксовой части (I) и антистоксовой части (II).

При этом часть I (стрелки, направленные вниз) происходит от умножения первого члена U_0^* на второй член U и третьего члена U_0^* на первый член U . Её зависимость от времени задаётся выражением

$$e^{+i[2\pi\nu - (\omega - \omega_0)]t} \tag{13}$$

Часть II (стрелки, направленные вверх) происходит от умножения первого или третьего члена U на второй или соответственно первый член U_0^* . Её временная зависимость задаётся выражением

$$e^{-i[2\pi\nu + (\omega - \omega_0)]t} \tag{13a}$$

Сопряжённые временные множители, которые возникают из обозначенного в (12) сопряжённого матричного элемента, надлежит также причислять к части I или соответственно II.

Мы будем называть (ср. также стр. 322) часть I *стоксовой*, а II — *антистоксовой*. Для обоснования таких названий мы перепишем (13) и (13a), добавив к ним сопряжённые выражения и учитывая (3) и (5), следующим образом:

Стоксова часть:

$$e^{\pm 2\pi i\nu' t}, \quad h\nu' = h\nu - (W - W_0) \tag{14}$$

Антистоксова часть:

$$e^{\mp 2\pi i\nu'' t}, \quad h\nu'' = h\nu + (W - W_0) \tag{14a}$$

В (14) вторичный световой квант $h\nu'$ мягче первичного $h\nu$ ($W - W_0$ положительно, даже если мы сначала и не положим W_0 равным нулю). Это соответствует правилу Стокса. Наоборот, в (14a) вторичный световой квант жестче первичного. Это противоречит правилу Стокса и исключается из-за нарушения закона сохранения энергии. То, что в нашем вычислении должны были получиться обе части, следовало ожидать из нашего написания (12) матричного элемента, который симметричен в собственных функциях начального и конечного состояний и, следовательно, содержит переход конечное \rightarrow начальное состояние в той же мере, что и переход начальное \rightarrow конечное состояние. Первый из них выпадает из нашего рассмотрения, и мы будем далее иметь дело только со *стоксовой частью*.

Выпишем её подробно, опуская временной множитель. Наша схема на стр. 483 даёт при учёте (11) и (11a) и значений N и N_0 :

$$\frac{b}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_y e^{i(K_x r) - i(k, r)}}{K^2 - \frac{2m}{h^2}(W - h\nu)} + \frac{k_{0y} e^{-i(K_x r) + i(k, r)}}{K_0^2 - \frac{2m}{h^2}(W_0 + h\nu)} \right)$$

Но экспоненты в обоих членах этого выражения совпадают, так как

$$K - k_0 = -K' + k = \left(k_x - \frac{2\pi}{\lambda} - k_{0x}, k_y - k_{0y}, k_z - k_{0z} \right). \quad (15)$$

Мы можем, следовательно, переписать предыдущую формулу в виде:

$$\frac{B}{(2\pi)^3} e^{i(K - k_0, r)}, \quad (15a)$$

где

$$B = b \left(\frac{k_y}{K^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(W - \hbar\nu)} + \frac{k_{0y}}{K_0'^2 - \frac{2m}{\hbar^2}(W_0 + \hbar\nu)} \right). \quad (15b)$$

Теперь следовало бы в соответствии с (12) перемножить (15a) с $q = x, y, z$ и проинтегрировать по $d\tau$. Легко видеть, однако, что это невозможно из соображений сходимости. Глубокая причина этого лежит в соотношении неопределённостей. До тех пор, пока мы рассматриваем волновые числа k и k_0 или относящиеся к ним импульсы $p = \hbar k$ и $p_0 = \hbar k_0$, как *точно* определённые, местоположение электрона является полностью *неопределённым*, т. е. распределено с равной вероятностью между всеми элементами $d\tau$ пространства. Этому соответствует то обстоятельство, что интегрирование экспоненты (возможно умноженной на q) по $d\tau$ приводит к *расходимости*. Мы должны, следовательно, отказаться от точного определения волновых чисел. Рассмотрим для этого не один-единственный электрон отдачи k или первоначально покоившийся электрон k_0 , но группу электронов, волновые векторы которых распределены вокруг среднего волнового вектора $k = k_1$ или $k_0 = 0$. Характер такого распределения мы опишем с помощью «зубцеобразной» функции $Z = Z(k, k_1)$, $Z_0 = Z(k_0, 0)$, имея при этом в виду, что Z и Z_0 отличаются от нуля только в окрестности $k = k_1$ или $k_0 = 0$, причём их поведение в этих точках мы фиксируем с помощью условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Z^2 dk = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} Z_0^2 dk_0 = 1 \quad (16)$$

(интегралы распространены на трёхмерное пространство, следовательно, $dk = dk_x dk_y dk_z$). Поскольку мы ограничиваемся рассмотрением стоковой части, для которой временной множитель надо брать из (14), а пространственный — из (15a), то напомним вместо (12):

$$M_q = \int dk Z(k, k_1) J + \text{компл.-сопр.}, \quad (17)$$

$$J = \frac{1}{(2\pi)^3} \int q d\tau \int dk_0 F(k, k_0) e^{i(r, K - k_0)}, \quad (17a)$$

$$F(k, k_0) = Z(k_0, 0) B e^{2\pi i \nu t}. \quad (17b)$$

Записью $F(k, k_0)$ мы подчёркиваем явно, что эта величина зависит через посредство B и ν от обеих переменных интегрирования k и k_0 .

Вычислим этот (шестикратный) интеграл J с помощью теоремы Фурье. Для этой цели его надо несколько преобразовать. Так как q является одной из составляющих радиуса-вектора r , то

$$\frac{\partial}{\partial k_{0q}} e^{i(r, K - k_0)} = -iq e^{i(r, K - k_0)}.$$

Поэтому мы можем написать сначала вместо (17а):

$$J = \frac{i}{(2\pi)^3} \int d\tau \int dk_0 F(k, k_0) \frac{\partial}{\partial k_{0q}} e^{i(r, K - k_0)}.$$

Отсюда путём интегрирования по частям по k_{0q} (множитель F обеспечивает исчезновение проинтегрированных членов при $k_{0q} = \pm \infty$) получается:

$$J = - \frac{i}{(2\pi)^3} \int d\tau \int dk_0 e^{i(r, K - k_0)} \frac{\partial}{\partial k_{0q}} F(k, k_0). \quad (17в)$$

Теперь к этому интегралу можно непосредственно применить теорему Фурье, которая утверждает, что он сводится к значению подинтегральной функции в точке обращения показателя экспоненты в нуль, т. е. в нашем случае в точке $k_0 = K$. Мы получаем:

$$J = -i \frac{\partial}{\partial k_{0q}} F(k, k_0), \quad (18)$$

причём после выполнения дифференцирования здесь надлежит положить $k_0 = K$. В силу (17б)

$$\frac{\partial}{\partial k_0} F = Z(k_0, 0) \frac{\partial}{\partial k_0} (Be^{2\pi i v' t}) + \frac{\partial Z}{\partial k_0} Be^{2\pi i v' t}. \quad (18а)$$

Первый член слева имеет вид простого зубца такого характера, как изображённый на рис. 38 сплошной линией; мы будем считать его симметрич-

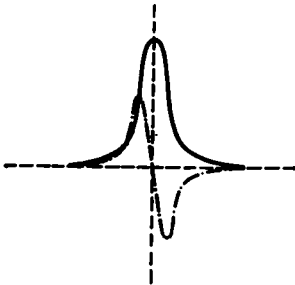


Рис. 38. Изображение зубцеобразной функции Z (сплошная кривая) и её производной $\frac{dZ}{dK}$ (штрих-пунктирная кривая).

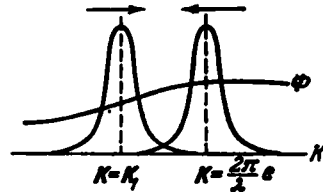


Рис. 39. Представление трёх множителей, из которых состоит подинтегральное выражение в (19), в одномерном случае.

ным $Z(-k_0) = Z(+k_0)$. Второй член является двойным зубцом такого типа, как изображённый на рис. 38 пунктирной кривой, с равными положительным и отрицательным выступами. (Наши рисунки представляют эти функции в одномерной шкале, на самом деле их надо, естественно, представлять трёхмерными.) Ясно, что двойной зубец не даёт после требуемого (17) второго интегрирования никакого вклада в результат, так как его положительная и отрицательная части приводят к взаимно уничтожающимся величинам. Мы можем поэтому опустить в (18а) второй член и написать:

$$J = -iZ(K, 0)\Phi, \quad \Phi = \frac{\partial}{\partial k_{0q}} (Be^{2\pi i v' t}), \quad (18б)$$

где после дифференцирования в Φ надо опять положить $k_0 = K$. Наконец, в силу (17) получаем:

$$M_q = -i \int dk Z(k, k_1) Z(K, 0) \Phi + \text{компл.-сопр.} \quad (19)$$

Теперь мы в состоянии получить окончательный вывод. Подинтегральное выражение в (19) содержит в двух своих первых множителях два острых зубца, вершины которых расположены в точках

$$k = k_1 \text{ и } K = 0, \text{ т. е. [см. (7)] } k = \frac{2\pi}{\lambda} e. \quad (20)$$

На рис. 39 изображены (опять в одномерной модели) оба эти зубца; из рисунка ясно, что третий множитель Φ подинтегрального выражения мы можем считать медленно меняющимся. Если оба особых значения (20) оказываются *отличными друг от друга*, то одна зубцеобразная функция обращается в нуль в вершине другой и их произведение будет везде равно нулю. Интеграл может получить конечное значение, только если оба зубца сдвигаются друг к другу (ср. стрелки на рис. 39), и только в этом случае мы получаем *конечное излучение*. Согласно (20) условием этого является

$$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda} e. \quad (21)$$

Мы будем называть это условие «законом сохранения импульса». Действительно, после умножения на \hbar в левой части оказывается импульс электрона отдачи, а в правой — падающего фотона. Тем самым (21) утверждает, что электрон отдачи забирает импульс падающей волны и вылетает в направлении её распространения (ср. рис. 40).

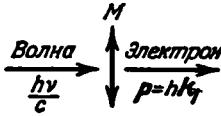


Рис. 40. Направление вылета электрона отдачи и матричного элемента.

Мы не можем ожидать большего от нашей настоящей точки зрения, так как до сих пор не ввели в вычисления импульс рассеянной волны. Это будет сделано только в следующем параграфе. Поэтому здесь мы можем получить только неполную форму закона сохранения импульса.

Следующий шаг будет состоять в том, что мы вычислим временной множитель у Φ в (19), и притом, как того требует (20), для значений $k = k_1$, $k_0 = K = 0$. Согласно (3) и (5) тогда будет $W_0 = 0$, $W = W_1 = \frac{\hbar^2}{2m} k_1^2$, и в силу (14)

$$h\nu' = h\nu - W_1. \quad (22)$$

Это равенство составляет *закон сохранения энергии* и притом в *точной форме*. Итак, временной множитель в Φ обеспечивает, чтобы падающая энергия оказывалась равной сумме рассеянной энергии и кинетической энергии электрона отдачи.

Из закона сохранения энергии и импульса можно получить и комптоновское изменение длины волны, но, конечно, не в правильной форме уравнения (1.1) из-за неверной теоремы импульса (21). Имению, из (21) следует:

$$k_1^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2, \quad W_1 = \frac{\hbar^2}{2m} k_1^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2},$$

и поэтому из (22)

$$\nu - \nu' = \frac{h}{2m\lambda^2}.$$

Если положить ещё $v = \frac{c}{\lambda}$, $v' = \frac{c}{\lambda'}$ и $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$, то мы получим:

$$\Delta\lambda = \frac{1}{2} \frac{h}{mc} \frac{\lambda'}{\lambda} = \frac{1}{2} \lambda_0 \frac{\lambda'}{\lambda} \sim \frac{1}{2} \lambda_0 \quad (23)$$

в противоречии с (1.1).

Займёмся теперь вычислением величины и направления матричного элемента M_q . Прежде всего мы получим для интеграла (19), если будем считать совпадающими оба сдвинутых друг к другу зубца Z и Z_0 ¹⁾:

$$\Phi \int dk Z Z_0 = \Phi \int dk Z^2 = \Phi, \quad (24)$$

благодаря чему

$$M_q = -i\Phi + \text{компл.-сопр.} \begin{cases} k = k_1, \\ k_0 = K = 0, \end{cases} \quad (24a)$$

откуда, согласно значению Φ из (18б),

$$M_q = -i \frac{\partial B}{\partial k_{0q}} e^{2\pi i v' t} + \text{компл.-сопр.} \begin{cases} k = k_1, \\ k_0 = K = 0. \end{cases} \quad (24б)$$

В этой формуле мы опустим член, отвечающий дифференцированию в (18б) экспоненты $e^{2\pi i v' t}$. Это можно оправдать следующим образом. Согласно (14) и (5)

$$\frac{\partial v'}{\partial k_{0q}} = \frac{1}{h} \frac{\partial W_0}{\partial k_{0q}}, \quad \frac{\partial W_0}{\partial k_{0q}} = \frac{\hbar^2}{m} k_{0q},$$

что, однако, обращается в нуль в силу отмеченного в (24a) условия $k_0 = 0$.

Поэтому из (15), если не выписывать не зависящего от k_0 члена и взять K'_0 из (7a), получается:

$$B = \dots + \frac{b k_{0y}}{\frac{4\pi}{\lambda} k_{0x} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - \frac{2\pi^2 m v}{h}}. \quad (25)$$

В силу $k_0 = 0$ это приводит к

$$\frac{\partial B}{\partial k_{0q}} = \begin{cases} 0 & \text{для } q = x \text{ или } q = z, \\ -\frac{b h}{8\pi^2 m v} & \text{для } q = y. \end{cases} \quad (25a)$$

Утверждение первой строки является очевидным. Во второй строке мы получили бы из (25) сначала

$$\frac{\partial B}{\partial k_{0q}} = \frac{b}{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - \frac{2\pi^2 m v}{h}}. \quad (25б)$$

Но в этом выражении можно пренебречь первым членом в знаменателе по сравнению со вторым, так как их отношение равно

$$\frac{2m}{h} v \lambda^2 = \frac{2mc}{h} \lambda = 2 \frac{\lambda}{\lambda_0}, \quad (25в)$$

а в нашем настоящем нерелятивистском рассмотрении мы обязаны считать падающее излучение не слишком жёстким, т. е. принять, что $\lambda \gg \lambda_0$. После этого (25б) принимает вид второй строки (25a).

Итак, мы заключаем из первой строки (25a): матричный элемент направлен только по оси y ; мы получаем диполь, который колеблется в на-

¹⁾ Это допустимое здесь суммарное рассмотрение будет уточнено в следующем параграфе.

правлении поляризации падающей волны (обозначенной на рис. 40 средней стрелкой). Что же касается величины дипольного момента, то в силу (24б) и второй строки (25а) она составляет:

$$M = M_y = \frac{ibh}{8\pi^2 m v} e^{2\pi i \nu' t} + \text{компл.-сопр.} = -\frac{bh}{4\pi^2 m v} \sin 2\pi \nu' t. \quad (26)$$

Если мы подставим сюда значение b из (7), то получится:

$$M = -\frac{e}{m} \frac{a}{2\pi v c} \sin 2\pi \nu' t. \quad (27)$$

Сравним этот результат с дипольным моментом электрона, колеблющегося в поле падающей волны, вычисленным классическим образом. Из векторного потенциала (1) для напряженности электрического поля падающей волны получается:

$$E = E_y = \frac{2\pi a}{\lambda} \sin 2\pi \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right). \quad (28)$$

Пусть электрон находится в точке $x = 0$ и пусть его смещение, которое происходит в направлении оси y , есть η . Уравнение движения электрона гласит:

$$m \ddot{\eta} = e E_y = \frac{2\pi a e}{\lambda} \sin 2\pi \nu t,$$

откуда

$$m \eta = -\frac{ae}{2\pi \lambda \nu^2} \sin 2\pi \nu t.$$

Таким образом, дипольный момент колеблющегося электрона составит:

$$M = M_y = \eta = -\frac{e}{m} \frac{a}{2\pi \nu c} \sin 2\pi \nu t. \quad (29)$$

Эта формула отличается от нашей формулы (27) лишь тем, что вместо «преобразованной» комптоновской частоты ν' , относительно которой классическое вычисление не может естественно ничего сказать, стоит первоначальная частота ν .

Из выражения (27) для M следует, согласно примечанию на стр. 53, выражение для среднего по времени значения излученной энергии:

$$\bar{S} = \frac{\pi}{2c} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left(\frac{a\nu^2}{\nu} \right)^2 \frac{\sin^2 \theta}{r^2}, \quad (30)$$

где θ означает угол между направлением дипольного момента и направлением излучения, а r — расстояние до точки наблюдения. С другой стороны, усредненное по времени значение падающей энергии [ср., например, (28)], составляет:

$$\bar{S}_0 = \frac{\pi}{2c} (\nu a)^2. \quad (31)$$

Отношение излученной энергии к падающей равно поэтому

$$S = \frac{\bar{S}}{\bar{S}_0} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left(\frac{\nu}{\nu} \right)^4 \frac{\sin^2 \theta}{r^2}. \quad (32)$$

Точно такая же формула, за исключением множителя $\left(\frac{\nu}{\nu} \right)^4$, получается, конечно, и из классически вычисленного момента (29).

3. МЕТОД ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Будем исходить из формулы (1.8.21) для электрического поля излучения¹⁾:

$$E = \frac{2\pi l \sqrt{e}}{c^2 R} \int j_{\perp} e^{\frac{2\pi i v'}{c} (T - \frac{R}{c})} d\tau + \text{компл.-сопр.}, \quad (1)$$

где T — время наблюдения, R — расстояние (бесконечно большое) точки наблюдения от ядра, а \mathbf{n} — единичный вектор в этом направлении. В отличие от (1.8.21) мы обозначили частоту через ν' , что найдёт своё оправдание в замечаниях после формулы (4). Экспоненциальный множитель под знаком интеграла является множителем, учитывающим запаздывание; j — электромагнитный ток, отвечающий переходу из начального в конечное состояние, а j_{\perp} — его составляющая, ортогональная к \mathbf{n} . Для j мы напишем в соответствии с (1.7.15) следующее выражение (которое уже умножено на измеренный в электромагнитных единицах заряд $\frac{e}{c}$):

$$j = \frac{e\hbar}{2imc} (U_0^* \text{grad } U - U \text{grad } U_0^*) - \frac{e^2}{mc^2} A u_0^* u. \quad (2)$$

Здесь U_0 и U — собственные функции, возмущённые падающей волной; то, что в последнем члене (2) мы можем заменить их невозмущёнными функциями u_0 и u , происходит благодаря тому, что мы можем рассматривать векторный потенциал A падающей волны (2.1), содержащий амплитуду a как малую первого порядка, и в окончательном результате пренебрегать малыми высшего порядка.

Мы покажем позже, что первый член в правой части (2), который мы будем называть j_1 , не вносит никакого вклада в интеграл в (1). Поэтому мы ограничимся сначала вторым членом:

$$j_2 = - \frac{e^2}{mc^2} A u_0^* u. \quad (3)$$

Согласно (2.1), (2.2), (2.4) и (2.7)

$$A u_0^* u = \frac{a}{2(2\pi)^3} (e^{i[2\pi\nu - (\omega - \omega_0)]t} e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})} + e^{-i[2\pi\nu + (\omega - \omega_0)]t} e^{i(\mathbf{K}' - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})}). \quad (4)$$

Первый член в скобках соответствует стоксовой части и образуется с помощью частоты ν' из (2.14), второй — антистоксовой части и образуется с помощью частоты ν'' из (2.14а). Мы интересуемся только стоксовой частью и поэтому уже заранее обозначили в (1) частоту через ν' . Так как временной множитель

(и притом в запаздывающем виде $e^{\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})}$) был вынесен там за знак интеграла, то его надо опустить в (4). Поэтому подлежащий вычислению в (1) интеграл, в силу (3) и (4), примет вид:

$$\frac{C}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})} e^{\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})} d\tau = \frac{C}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0 + \frac{2\pi \nu'}{c} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r})} d\tau, \quad (5)$$

$$C = - \frac{a}{2} \frac{e^2}{mc} p_{\perp}. \quad (5a)$$

¹⁾ В (1) мы выбрали у i знак, противоположный использованному в (1.8.21), чтобы получить такую же зависимость от времени, как и в предыдущем параграфе, в особенности в (2.13). Так как в (1) всё равно добавляется комплексно-сопряжённое выражение, то это является законным. Согласно (1.7.15), сделанному в (1) выбору знака у i соответствует такое написание тока, которое применено в (2).

С последним множителем в (5а) дело обстоит следующим образом. Ток j_z имеет векторный характер, причём его направление, как это показывает (3), совпадает с направлением вектора-потенциала A , т. е. с направлением поляризации падающей волны, которое мы обозначим через p . Так же направлено и наш интеграл (5). Однако уравнение (1) требует, чтобы использовалась только составляющая тока, ортогональная к n . Этому как раз соответствует исправление (5) с помощью множителя

$$p_{\perp} = p - (pn)n. \quad (5б)$$

Через угол θ из (2.30) этот множитель выражается в виде:

$$p_{\perp} = \sin \theta. \quad (5в)$$

Для дальнейшего нам будет полезно выписать также:

$$p_{\perp} = [pn]. \quad (5г)$$

однако это уравнение нельзя понимать в смысле векторного равенства; при аккуратной записи в правой части (5г) следовало бы писать $|[pn]|$.

Интеграл (5) является, однако, расходящимся, так же как и выражения для матричного элемента M_q из предыдущего параграфа. Поэтому мы поступим так же, как и там, т. е. введём вместо точно определённого волнового числа $k_0 = 0$ группы волн

$$\int Z_0 dk_0 \dots, \quad (6)$$

где $Z_0 = Z(k_0, 0)$ — зубцеобразная функция¹⁾ описанного в (2.16) вида. При этом по k_0 надо интегрировать не только пространственный интеграл (5), но и множитель v' и временной множитель (1), так как в силу значения v' в (2.14) они со своей стороны зависят от k_0 . Мы получим тогда для электрического поля из (1), (5) и (6) аналогично (2.17):

$$E = \frac{2\pi i C}{c^2 R} J + \text{компл.-сопр.}, \quad (7)$$

$$J = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\tau \int dk_0 F(k, k_0) e^{i(K - k_0 + \frac{2\pi v'}{c} n, \tau)}, \quad (7а)$$

$$F(k, k_0) = Z(k_0, 0) v' e^{2\pi i v' (T - \frac{R}{c})}. \quad (7б)$$

Однако интеграл J только внешне имеет форму интеграла Фурье вида (2.17в). Действительно, множитель v' в показателе в J сам уже содержит переменные k , k_0 , и притом *квадратично*. Именно, в силу (2.14):

$$v' = v - \frac{W - W_0}{h} = v - \frac{\hbar}{4\pi m} (k^2 - k_0^2). \quad (8)$$

Для того чтобы было можно применить теорему Фурье, нам надо переписать показатель у e в (7а) в линейной форме, а именно в виде:

$$e^{i(\tau, l - k_0)}, \text{ где } \begin{cases} l = K + \frac{2\pi}{c} \left(v - \frac{\hbar}{4\pi m} k^2 \right) n, \\ l_0 = k_0 - \frac{2\pi}{c} \frac{\hbar}{4\pi m} k_0^2 n. \end{cases} \quad (9)$$

¹⁾ Вторая использованная там зубцеобразная функция $Z = Z(k, k_0)$ здесь нам не требуется.

Тогда l зависит только от k , а l_0 — только от k_0 , и в качестве переменной интегрирования можно будет выбрать l_0 вместо k_0 . Тогда надо будет совершить замену

$$dk_0 \text{ на } \frac{dl_0}{\Delta_0},$$

где Δ_0 означает функциональный детерминант:

$$\Delta_0 = \left| \frac{\partial l_0}{\partial k_0} \right|. \quad (10)$$

Наш интеграл J примет тогда вид:

$$J = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\tau \int dl_0 e^{i(\tau, t-l_0)} F_1(l, l_0), \quad (11)$$

где

$$F_1(l, l_0) = \frac{F(k, k_0)}{\Delta_0}. \quad (12)$$

Эта формула имеет тот смысл, что в правой части надлежит подставить в F и в Δ_0 вместо k и k_0 их выражения через l и l_0 , которые получаются из формул (9).

Применим теперь к (11) теорему Фурье:

$$J = F_1(l, l) = \left(\frac{F(k, k_0)}{\Delta_0} \right)_{l_0=l}. \quad (13)$$

Подставляя это значение в (7) и учитывая (76), получаем:

$$E = -\frac{4\pi}{c^2} \frac{C}{R} \left[\frac{Z(k_0, 0)}{\Delta_0} \nu' \sin 2\pi\nu' \left(T - \frac{R}{c} \right) \right]_{l=l_0}. \quad (14)$$

Это выражение представляет собой электрическое поле, излучающееся при переходе начальной группы Z_0 в *определённое*, произвольно выбранное состояние k . Мы должны, однако, принять во внимание *все возможные состояния* k , т. е. проинтегрировать по k , и притом интенсивность, а не поле, так как речь идёт о некогерентных переходах. В соответствии с этим усредним E^2 по времени и проинтегрируем его после этого по k :

$$\int \overline{E^2} dk = \frac{8\pi^2}{c^4} \frac{C^2}{R^2} \int \left(\frac{Z^2(k_0, 0) \nu'^2}{\Delta_0^2} \right)_{l=l_0} \frac{dk_0}{\Delta}, \quad \Delta = \left| \frac{\partial k_0}{\partial k} \right|. \quad (15)$$

В правой части этого выражения мы перешли от интегрирования по k к интегрированию по k_0 , что потребовало добавления функционального детерминанта Δ . Это возможно в силу того обстоятельства, что благодаря соотношениям (9) между k и k_0 существует функциональная зависимость; такой переход требуется для того, чтобы мы могли бы воспользоваться свойствами зубцеобразной функции $Z(k_0, 0)$.

В самом деле, $Z(k_0, 0)$ отлична от нуля только для $k_0 = 0$. Но в силу (9) для $k_0 = 0$ будет также и $l_0 = 0$. Следовательно, мы должны построить в (15) круглую скобку для значения $l = l_0 = 0$. Но в силу (9) $l = 0$ означает:

$$K = -\frac{2\pi}{c} \left(\nu - \frac{\hbar}{4\pi m} k^2 \right) n. \quad (16)$$

Круглую скобку правой части здесь можно заменить, используя (8) для случая $k_0 = 0$, на v' . В левой же части можно подставить для K его значение (2.7). Тогда из (16) после умножения на h получается:

$$\frac{h\nu}{c} e = h\bar{k} + \frac{h\nu'}{c} n. \quad (17)$$

Это равенство представляет собой точный закон сохранения импульса для эффекта Комптона. С другой стороны, закон сохранения энергии уже содержится в (опять ввятом для случая $k_0 = 0$) уравнении (8) и может быть написан в виде:

$$h\nu = h\nu' + W, \quad W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (18)$$

Взяты вместе уравнения (17) и (18) приводят известным образом к правильному уравнению Комптона (1.1) или (1.2).

Вернёмся теперь к (15) и выполним интегрирование по k с помощью условия нормировки (2.16) для Z_ν . Мы получаем:

$$\int \bar{E}^2 dk = \frac{8\pi^2 C^2}{c^4 R^2} \frac{\nu^2}{\Delta_0^2 \Delta}. \quad (19)$$

ν' имеет здесь комптоновское значение, которое получается из (17) и (18). Вычислением Δ_0 и Δ мы займёмся ниже. Сначала мы перейдём от (1) к среднему значению потока энергии:

$$\bar{S} = \frac{c}{4\pi} \int \bar{E}^2 dk = \frac{2\pi C^2}{c^3 R^2} \frac{\nu^2}{\Delta_0^2 \Delta}. \quad (19a)$$

Подставляя сюда значение C из (5a), получаем:

$$\bar{S} = \frac{\pi}{2c} \left(\frac{e^2 a^2}{mc^2} \right)^2 \frac{\nu^2}{\Delta_0^2 \Delta} \frac{p_\perp^2}{R^2}. \quad (20)$$

Если мы поделим это выражение на падающий поток энергии (2.31):

$$\bar{S}_0 = \frac{\pi}{2c} (\nu a)^2, \quad (20a)$$

то, используя ещё и (5b), получим:

$$S = \frac{\bar{S}}{\bar{S}_0} = \left(\frac{e^2 a^2}{mc^2} \right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \frac{1}{\Delta_0^2 \Delta} \frac{\sin^2 \theta}{R^2}. \quad (21)$$

Определим теперь знаменатель Δ_0 . Мы докажем, что

$$\Delta_0 = 1. \quad (22)$$

При этом, для того чтобы избежать в дальнейшем повторения, мы проведём вычисление сразу в релятивистском виде, что не приведёт к каким-либо затруднениям.

В этом случае мы должны определить входящие в (9) кинетические энергии не соотношениями

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \frac{p_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m},$$

но, обозначая временно энергию покоя E_{00} через

$$E - E_{00} \text{ и соответственно } E_0 - E_{00} \quad (23)$$

с известным релятивистским значением для E и E_0 :

$$E = \sqrt{E_{00}^2 + \hbar^2 c^2 k^2}, \quad E_0 = \sqrt{E_{00}^2 + \hbar^2 c^2 k_0^2}. \quad (23a)$$

Второе из уравнений (9) переходит тогда в

$$l_0 = k_0 - \frac{E_0 - E_{00}}{c\hbar} n, \quad (23б)$$

а уравнение $l = l_0$ в

$$k - \frac{2\pi}{c} v e + \left(\frac{2\pi}{c} v - \frac{E - E_0}{c\hbar} \right) n = k_0 - \frac{E_0 - E_{00}}{c\hbar} n. \quad (23в)$$

Путём дифференцирования обоих этих уравнений и благодаря (23а) получается:

$$dl_0 = dk_0 - \frac{\hbar c}{E_0} n (k_0 dk_0), \quad (24)$$

$$dk - \frac{\hbar c}{E} n (k dk) = dk_0 - \frac{\hbar c}{E_0} n (k_0 dk_0). \quad (25)$$

Теперь мы воспользуемся свободой в выборе направлений, по которым берутся компоненты векторов. Первую компоненту n векторов l_0 и k_0 возьмём в направлении вектора n , а две другие компоненты s и t — в перпендикулярных направлениях. Тогда в силу (24) будет:

$$dl_{0n} = dk_{0n} - \frac{\hbar c}{E_0} (k_0, dk_0), \quad dl_{0s} = dk_{0s}, \quad dl_{0t} = dk_{0t}.$$

Вследствие этого детерминант (10) вырождается в диагональный член:

$$\frac{\partial l_{0n}}{\partial k_{0n}} \cdot 1 \cdot 1 = 1 - \frac{\hbar c}{E_0} k_{0n} = 1 - \frac{\hbar c}{E_0} (k_0 n).$$

Но для $k_0 \rightarrow 0$ отсюда действительно следует $\Delta_0 = 1$, как это и утверждалось в (22). Поэтому, в силу сказанного выше, (22) справедливо как в релятивистском, так и в нерелятивистском случаях.

Вычислим таким же способом и функциональный детерминант Δ из (15):

$$\Delta = \left| \frac{\partial k_0}{\partial k} \right|,$$

где k_0 и k опять связаны друг с другом условием $l_0 = l$. При том же самом выборе направлений n, s, t мы получаем согласно (25):

$$\left. \begin{aligned} dk_{0n} - \frac{\hbar c}{E_0} (k_0, dk_0) &= dk_n - \frac{\hbar c}{E} (k, dk), \\ dk_{0s} &= dk_s, \quad dk_{0t} = dk_t. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Из первой строчки, если использовать теперь условие $k_0 = 0$, будет следовать:

$$\frac{\partial k_{0n}}{\partial k_n} = 1 - \frac{\hbar c}{E} k_n, \quad (26a)$$

а из второй:

$$\frac{\partial k_{0s}}{\partial k_s} = 1, \quad \frac{\partial k_{0t}}{\partial k_t} = 1, \quad \frac{\partial k_{0s}}{\partial k_n} = \frac{\partial k_{0t}}{\partial k_t} = 0 \text{ и т. д.} \quad (26б)$$

Вследствие этого и функциональный детерминант Δ вырождается в диагональный член

$$\Delta = \frac{\partial k_n}{\partial k_n} \cdot 1 \cdot 1 = 1 - \frac{\hbar c}{E} k_n = 1 - \frac{\hbar c}{E} (kn). \quad (27)$$

Подставив сюда для k его значение из закона сохранения импульса (17)

$$\hbar k = h(\nu e - \nu' n)$$

и учитывая, что $(en) = \cos \vartheta$, заключаем:

$$\hbar c (kn) = h(\nu \cos \vartheta - \nu').$$

Если мы используем ещё для ν' его значение из переписанного в релятивистском виде закона сохранения энергии (18):

$$\nu - \nu' = \frac{E - E_0}{\hbar},$$

то у нас получится:

$$\hbar c (kn) = h\nu(\cos \vartheta - 1) - (E - E_{00}).$$

Подстановка в (27) даёт:

$$\Delta = \frac{E_{00}}{E} \left[1 + \frac{\hbar \nu}{E_{00}} (1 - \cos \vartheta) \right] = \frac{E_{00}}{E} \left[1 + \frac{\lambda_c}{\lambda} (1 - \cos \vartheta) \right].$$

Наконец, если мы воспользуемся уравнением Комптона (1.2) и будем в дальнейшем опять обозначать энергию покоя через E_0 , а не E_{00} , то мы сможем переписать последнее соотношение в простом виде:

$$\Delta = \frac{E_0}{E} \frac{\nu}{\nu'}. \quad (28)$$

Это значение Δ будет использовано в релятивистском расчёте следующего параграфа. Для нерелятивистского же расчёта допустимо, конечно, заменить E на E_0 , т. е. (28) на

$$\Delta = \frac{\nu}{\nu'}. \quad (28a)$$

На основании установленных уравнениями (22) и (28a) значений Δ_0 и Δ (21) переходит в

$$S = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \frac{\sin^2 \theta}{R^2}. \quad (29)$$

Итак, мы получили ту же формулу, что и найденная с помощью метода матричных элементов (2.32), но только с изменённой степенью $\frac{\nu'}{\nu}$.

Уравнение (29) относится к поляризованному падающему излучению. Мы перейдём к случаю неполяризованного излучения, если сложим действие двух некогерентных взаимно ортогональных поляризаций p_1 и p_2 . Мы можем при этом считать, что p_1 лежит в плоскости, определяемой направлениями падающей волны e и направлением наблюдения n , а p_2 перпендикулярно к этой плоскости. Тогда с помощью уже использованного обозначения $\vartheta = (\widehat{e, n})$ будет:

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \frac{\pi}{2} + \vartheta, & \sin^2 \theta_1 &= \cos^2 \vartheta, \\ \theta_2 &= \frac{\pi}{2}, & \sin^2 \theta_2 &= 1, \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

т. е. на месте $\sin^2 \theta$ появляется

$$\frac{1}{2} (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2) = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2}$$

и (22) переходят в

$$S = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \left(\frac{v}{v}\right)^3 \frac{1}{R^2} \frac{1 + \cos^2 \theta}{2}. \quad (31)$$

В § 4 мы сравним этот результат с формулой Клейна—Нишины.

Нам надо теперь кратко рассмотреть первую часть представляемого (2), тока

$$j_1 = \frac{e\hbar}{2im} (U_0 \text{grad } U^* - U \text{grad } U_0^*)$$

и показать, что она действительно не приводит к какому-либо вкладу в излучение, как мы это утверждали выше. Входящие сюда возмущённые собственные функции U , U_0^* представляются выражениями (2.11), (2.11а). Следуя развитой на стр. 483 схеме, мы получим с помощью элементарных выкладок, в ходе которых надо учитывать (2.15), для стоксовой части j_1 , с опущенным временным множителем $e^{2\kappa_0 t}$:

$$j_1 = \frac{e\hbar}{2m} \frac{B}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{x} - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})},$$

$$B = b \left(\frac{k_y (k_0 + K)_\perp}{K^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - h\nu)} + \frac{k_{0y} (k + K'_0)_\perp}{K'^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W + h\nu)} \right). \quad (32)$$

Эти формулы записаны аналогично формулам (2.15а, б). Наше теперешнее B отличается от фигурировавшего там B только вошедшими в числители (32) векторами; значок \perp указывает, что в излучении снова принимают участие только перпендикулярные к направлению наблюдения составляющие этих векторов.

Для вычисления получающегося из j_1 поля E_1 нам надо было бы подставить (32) в (1) и, так как интеграл, очевидно, расходится, привлечь зубцеобразную функцию Z_0 . Вывод законов сохранения импульса и энергии привёл бы к тем же результатам, что и выше. Закон сохранения импульса требовал бы [ср. (16)]:

$$K = -\frac{2\pi v}{c} n. \quad (33)$$

Функция Z_0 привела бы опять к $k_0 = 0$. Величина B (входящая в E_1 в качестве множителя) свелась бы тогда к

$$B = \frac{bk_y K_\perp}{K^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - h\nu)}.$$

Здесь, однако, K пропорционально n согласно (33), откуда

$$K_\perp = 0 \text{ и, следовательно, } B = 0 \text{ и } E_1 = 0, \quad (34)$$

что и требовалось доказать.

§ 4. ЭФФЕКТ КОМПТОНА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ ПО УРАВНИЮ ДИРАКА

Если речь идёт о длинах волн, сравнимых или меньших комптоновской длины волны

$$\lambda_0 = \frac{h}{m_0 c}, \quad (1)$$

то нам придётся обратиться к уравнению Дирака. Для свободного, невозму-

щённого электрона это уравнение гласит:

$$Lu = \sum_1^4 \gamma_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} + \frac{E_{00}}{\hbar c} u = 0, \quad (2)$$

где $E_{00} = m_0 c^2$ — энергия покоя, которая обозначена с двумя индексами 0, как и в (3.23), для отличия от начальной энергии E_0 (позднее, при переходе к первоначально покоящемуся электрону, E_0 и E_{00} будут совпадать друг с другом). Сопряжённым уравнением для свободного электрона будет, согласно (IV.4.11),

$$vM = - \sum_1^4 \frac{\partial v}{\partial x_\alpha} \gamma_\alpha + v \frac{E_{00}}{\hbar c} = 0. \quad (3)$$

Мы получим из (2) уравнение для состояния U , возмущённого вектор-потенциалом A падающей волны, если заменим согласно (IV.2.5):

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \text{ на } \frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \frac{ie}{\hbar c} A_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Так как в возмущающем члене мы можем заменить U на u , то получаем:

$$LU = \frac{ie}{\hbar c} (\gamma A) u, \quad (\gamma A) = \sum_1^3 \gamma_\alpha A_\alpha. \quad (4)$$

Для A мы воспользуемся представлением (2.1) с той разницей, что мы обозначим для общности направление распространения падающей волны (прежнее направление оси x) через e , а направление поляризации (прежнее направление оси y) через p , причём, естественно, должно выполняться условие $(pe) = 0$. Иными словами, мы напишем вместо (2.1):

$$A = \frac{a}{2} p (e^{2\pi i (vt - \frac{ex}{\lambda})} + \text{компл.-сопр.}). \quad (5)$$

Вводя четырёхмерный волновой вектор x_α нулевой длины:

$$x_\alpha = \frac{2\pi}{\lambda} \{e, i\}, \quad \sum_1^4 x_\alpha^2 = 0, \quad (5a)$$

мы сможем написать вместо (5) ещё проще (опуская знак суммирования $\sum_{\alpha=1}^4$):

$$A = \frac{a}{2} p (e^{-ix_\alpha x_\alpha} + e^{+ix_\alpha x_\alpha}). \quad (5b)$$

Мы получим тогда из (4):

$$LU = \frac{iea}{2\hbar c} (\gamma p) (e^{-ix_\alpha x_\alpha} + e^{+ix_\alpha x_\alpha}) u \quad (6)$$

и соответственно для сопряжённого возмущённого состояния V :

$$VM = \frac{iea}{2\hbar c} v (\gamma p) (e^{-ix_\alpha x_\alpha} + e^{+ix_\alpha x_\alpha}). \quad (6a)$$

Решения u и v невозмущённого уравнения Дирака, мы напишем в симметричной форме (IV.4.10 и 12):

$$u = A e^{ik_\alpha x_\alpha}, \quad v = B e^{-ik_\alpha x_\alpha}. \quad (7)$$

Постоянные A и B зависят от матриц γ , их значения были приведены в § 4 гл. IV. Здесь и в дальнейшем мы будем использовать, как и на стр. 200, удобные сокращённые обозначения:

$$k_a = \frac{iE}{\hbar c}, \quad k_{00} = \frac{E_{00}}{\hbar c}. \quad (7a)$$

Вводя дальнейшие сокращённые обозначения:

$$K_a = k_a - \chi_a, \quad K'_a = k_a + \chi_a. \quad (8)$$

мы встретимся при подстановке (7) в (6) и (6a) с экспонентами:

$$\left. \begin{aligned} e^{iK_a x_a} + e^{iK'_a x_a} & \text{ в (6),} \\ e^{-iK'_a x_a} + e^{-iK_a x_a} & \text{ в (6a).} \end{aligned} \right\} \quad (8a)$$

Исходя из уравнений $k_a^2 + k_{00}^2 = 0$ [уравнение (IV.4.8a)] и $\chi_a^2 = 0$ [уравнение (5a)], легко доказывается соотношение

$$-(K_a^2 + k_{00}^2) = K_a'^2 + k_{00}^2 = 2k_a \chi_a. \quad (86)$$

Теперь (6) можно непосредственно проинтегрировать в виде:

$$U = u - \frac{ea}{2\hbar c} (De^{iK_a x_a} - D'e^{iK'_a x_a})(\gamma p) A, \quad (9)$$

где D и D' — две постоянные, зависящие от матриц γ , которые мы сейчас определим. Член u добавлен как решение однородного уравнения $L = 0$, с тем чтобы обеспечить переход решения при $a = 0$ в невозмущённую собственную функцию (7). Подстановка (9) в (6) и приравнивание коэффициентов при одинаковых экспонентах в левой и правой частях приводят к

$$(\gamma_a K_a - ik_{00})D = -1; \quad (\gamma_a K'_a - ik_{00})D' = +1.$$

Отсюда следует:

$$(K_a^2 + k_{00}^2)D = -(\gamma_a K_a + ik_{00}), \quad (K_a'^2 + k_{00}^2)D' = (\gamma_a K'_a + ik_{00})$$

и с помощью (86)

$$D = \frac{\gamma_a K_a + ik_{00}}{D_1}, \quad D' = \frac{\gamma_a K'_a + ik_{00}}{D_1}, \quad D_1 = 2k_a \chi_a. \quad (10)$$

Точно так же (6a) интегрируется в форме

$$V = v - \frac{ea}{2\hbar c} B(\gamma p)(De^{-iK_a x_a} - D'e^{-iK'_a x_a}). \quad (11)$$

Подстановка в (10) доказывает, что D и D' имеют те же самые значения (10), что и в (9).

Вместо (9) и (11) мы можем, конечно, написать и

$$\left. \begin{aligned} U &= \left[1 - \frac{ea}{2\hbar c} (De^{-i\chi_a x_a} - D'e^{+i\chi_a x_a})(\gamma p) \right] u, \\ V &= v \left[1 - \frac{ea}{2\hbar c} (\gamma p)(De^{+i\chi_a x_a} - D'e^{-i\chi_a x_a}) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Выражения U_0 , V_0 для начального состояния получаются из U и V , если мы заменим в правой части (12) в u , v , D и т. д. везде k'_α на $k_{0\alpha}$.

Перейдём теперь к смешанному члену в выражении для тока, получающемуся при комбинации состояний U_0 , V_0 и U , V . В силу (IV.3.14) он равен

$$j = iceV_0\gamma U. \quad (13)$$

Подставляя сюда выражения (12) и выполняя умножение, мы получим, во-первых, член нулевого порядка по a , который отвечает невозмущённым состояниям, т. е. простому релеевскому рассеянию, которое нас здесь не интересует; далее, член второго порядка по a , которым, конечно, следует пренебречь, и, наконец, члены первого порядка по a , два из которых будут носить *стоксов* и два — *антистоксов* характер. Если мы обозначим последние многоточием, то получим:

$$j = Cv_0(\gamma p) [\dots - D'_0 e^{-ix_\alpha} a] \gamma u + \\ + Cv_0 \gamma [D e^{-ix_\alpha} a - \dots] (\gamma p) u, \quad C = \frac{ie^2 a}{2\hbar}. \quad (13a)$$

Действительно, временная зависимость выписанных здесь членов, которая определяется множителями v_0 , e^{-ix_α} и u , имеет, если учесть (5a) и (7a), следующий вид:

$$e^{(-ik_{0\alpha} - ix_\alpha + ik_\alpha) x_\alpha} = e^{2\pi i \left(\nu - \frac{E - E_0}{\hbar} \right) t} = e^{2\pi i \nu' t}; \\ h\nu' = h\nu - (E - E_0),$$

в то время как зависимость невыписанных членов от времени определяется множителем

$$e^{(-ik_{0\alpha} + ix_\alpha + ik_\alpha) x_\alpha} = e^{-2\pi i \left(\nu + \frac{E - E_0}{\hbar} \right) t} = e^{-2\pi i \nu'' t}; \\ h\nu'' = h\nu + (E - E_0).$$

В этих выражениях ν' и ν'' — введённые в (2.14) и (2.14a) частоты (с той разницей, что теперь надо заменить нерелятивистскую разность энергий $W - W_0$ на релятивистскую $E - E_0$).

Мы вынесем в (13) временной множитель и все множители, зависящие от координат, и обозначим *постоянные*, но зависящие от матриц γ части функций u , u_0 , v и v_0 через ψ , ψ_0 , $\bar{\psi}$ и $\bar{\psi}_0$. Тогда представляемая (13) стоксова часть тока (назовём её j_1) запишется как

$$\left. \begin{aligned} j_1 &= C \bar{\psi}_0 F \psi e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_0, \mathbf{r})} e^{2\pi i \nu' t}, \\ F &= -(\gamma p) D'_0 \gamma + \gamma D (\gamma p). \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Наряду с (13) нам надо рассматривать и «сопряжённый» ток

$$j = iceV\gamma U_0,$$

который соответствует «комплексно-сопряжённому» току нерелятивистского расчёта. Он также приводит к возникновению стоксовой и антистоксовой частей. Мы получаем тогда в записи, аналогичной (13a):

$$j = Cv(\gamma p) [D e^{ix_\alpha} a - \dots] \gamma u_0 + Cv\gamma [\dots - D'_0 e^{ix_\alpha} a] (\gamma p) u_0,$$

где общим временным множителем выписанных членов является $e^{-2\pi i \nu' t}$. Отсюда после приведения к виду (14) получается:

$$j_3 = -C \bar{\psi} \bar{F} \psi_0 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0, \mathbf{r})} e^{-2\pi i \nu' t},$$

$$\bar{F} = -(\gamma \mathbf{p}) D \gamma + \gamma D'_0 (\gamma \mathbf{p}), \quad (14a)$$

при этом обозначение \bar{F} означает, что эта величина сопряжена к F . Для того чтобы перейти от тока через вектор-потенциал к полю излучения, мы можем использовать почти без изменения формулы предыдущего параграфа, в которых только везде на месте «комплексно-сопряжённого» тока \mathbf{j}^* возникнет теперь «сопряжённый» ток \mathbf{j}_3 . Мы получаем аналогично (3.1):

$$E = \frac{2\pi i \nu'}{c^2} e^{\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})} \int j_1 e^{2\pi i \frac{\nu'}{c} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})} d\tau -$$

$$- \frac{2\pi i \nu'}{c^2} e^{-\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})} \int j_2 e^{-2\pi i \frac{\nu'}{c} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})} d\tau. \quad (15)$$

Штрих у j_1 и j_3 означает здесь, что из выражений (14) и (14a) извлечён временной множитель, так как он уже выписан явно перед знаками интегралов. Кроме того, мы подразумеваем, что, поскольку в (3.1) участвовала только компонента вектора \mathbf{j} , нормальная к \mathbf{n} , т. е. [ср. (3.5r)] произведение $[\mathbf{j}\mathbf{n}]$, то в выражениях для j_1 и j_2 уже выполнено векторное умножение на \mathbf{n} , поэтому в (14) и (14a) F и \bar{F} заменены на $[F\mathbf{n}]$ и $[\bar{F}\mathbf{n}]$. Если мы объединим временно все постоянные в (14), (14a) в C_1 и C_2 , то интегралы (15) можно будет записать аналогично (3.5):

$$\left. \begin{matrix} C_1 \\ C_2 \end{matrix} \right\} \int e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0 + \frac{2\pi \nu'}{c} \mathbf{n}, \mathbf{r})} d\tau, \quad (15a)$$

причём из сравнения с (15) и при учёте (14), (14a) следует, что

$$C_1 = C \bar{\psi}_0 [F\mathbf{n}] \psi, \quad C_2 = C \bar{\psi} [\bar{F}\mathbf{n}] \psi_0 = \bar{C}_1. \quad (15b)$$

Поскольку интеграл в (15a) расходится, введём зубцеобразную функцию Z_0 из (3.6). Тогда интегрирование выполняется так же, как и в (3.7), и приводит к аналогу формулы (3.14):

$$E = \frac{2\pi i \nu'}{c^2 R} \left(\frac{Z_0}{\Delta_0} \left\{ C_1 e^{\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})} - C_2 e^{-\frac{2\pi i \nu'}{c} (T - \frac{R}{c})} \right\} \right)_{t=t_0}. \quad (16)$$

Принимая во внимание все возможные конечные состояния, перейдём, согласно правилу в (3.15), к интегралу:

$$\int E^3 dk = \frac{4\pi^3}{c^4 R^3} \int \frac{Z_0^2}{\Delta_0^2} \nu'^2 (C_1 C_2 + C_2 C_1 + \dots) \frac{dk_0}{\Delta}. \quad (17)$$

Члены, зависящие от времени, обозначены внутри круглых скобок многоточием, так как они всё равно выпадут при усреднении по времени, которое будет предпринято ниже. Как и в (3.17), (3.18), мы получим из свойств зубцеобразной функции теоремы импульса и энергии и притом теперь в релятивистской форме. В дальнейшем мы будем понимать под ν' получающееся из теорем импульса и энергии комптоновское значение (1.2). В результате

интегрирования с зубцеобразной функцией надо будет положить везде $\bar{k}_0 = 0$ и различие между начальной энергией E_0 и энергией покоя E_{00} исчезнет, так что в дальнейшем мы сможем обозначать энергию покоя через E_0 .

Для окончательного вычисления (17) заметим, что $C_1 C_2 = C_2 C_1$; действительно, $C_2 C_1$ будет, как мы увидим, свободно от матриц γ . Выполняя теперь усреднение по времени и подставляя значения C_1, C_2 из (15), получим аналог формулы (3.19):

$$\int \bar{E}^2 dk = \frac{8\pi^2}{c^4} \frac{C^2}{R^2} \frac{v^2}{\Delta_0^2 \Delta} \bar{\psi} [\bar{F}n] \psi_0 \bar{\psi}_0 [Fn] \psi. \quad (17a)$$

Мы подставим сюда значение C из (13a), значения Δ_0, Δ из (3.22) и (3.28) и перейдём, согласно (3.19a), к излучаемой энергии. Получим:

$$\bar{S} = \frac{\pi}{2} \frac{c}{R^2} \left(\frac{e^2 a}{c^2 \hbar} \right)^2 \frac{E}{E_0} \frac{v^2}{v} \Phi, \quad (17b)$$

где мы положили для сокращения

$$\Phi = \bar{\psi} [\bar{F}n] \psi_0 \bar{\psi}_0 [Fn] \psi, \quad (18)$$

или, переходя путём деления на S_0 [уравнение (3.20a)] к относительной величине,

$$S = \left(\frac{e^2}{c \hbar R} \right)^2 \frac{E}{E_0} \left(\frac{v}{v} \right)^2 \Phi. \quad (18a)$$

Нам осталось ещё выяснить значение Φ . Прежде всего весьма просто вычисляется внутренний множитель $\psi_0 \bar{\psi}_0$ в (18). Мы будем считать его *усреднённым* по обеим, не наблюдаемым возможным ориентациям спина покоящегося электрона. Тогда мы можем применить уравнение (VII. 7.18), если положим в нём в соответствии с тем, что электрон покоится, $k_2 = 0, E_2 = E_0$; тогда участвующие там символы Γ_2 и $\bar{\Gamma}_2$ будут иметь то же значение, что и наши ψ_0 и $\bar{\psi}_0$. Итак, получаем из этого уравнения:

$$\sum \psi_0 \bar{\psi}_0 = \frac{1 + \gamma_4}{2},$$

и потому для среднего значения

$$\psi_0 \bar{\psi}_0 = \frac{1}{4} (1 + \gamma_4). \quad (19)$$

Рассмотрим теперь величину $D_1 D$ из (10):

$$D_1 D = (\gamma K) + \gamma_4 K_4 + i k_{00}. \quad (20)$$

Но в силу (8) $K = k - \varkappa$ и из закона сохранения импульса (для первоначально покоящегося электрона)

$$k - \varkappa = - \frac{2\pi\gamma'}{c} n. \quad (20a)$$

Если учесть теперь (7a) и (5a), то тогда (20) перейдёт в

$$D_1 D = - \frac{2\pi\gamma'}{c} (\gamma n) + i \gamma_4 \left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{2\pi\nu}{c} \right) + \frac{i E_0}{\hbar c}. \quad (20b)$$

Теперь используем закон сохранения энергии, который может быть записан (при первоначально покоящемся электроном) в виде:

$$\hbar\nu - E = \hbar\nu' - E_0 \quad (20в)$$

и получим подстановкой в (20б):

$$D_1 D = -\frac{2\pi\nu'}{c} \{(\gamma n) + i\gamma_4\} + \frac{iE_0}{\hbar c} (1 + \gamma_4). \quad (20г)$$

Далее, для D_1 получается в силу (10) и (20а):

$$\frac{1}{2} D_1 = (\hbar \mathbf{k}) + k_4 x_4 = \frac{2\pi\nu}{c} \left[-\frac{2\pi\nu'}{c} (ne) + \frac{2\pi\nu}{c} - \frac{E}{\hbar c} \right],$$

или, опять используя закон сохранения энергии (20в):

$$\frac{1}{2} D_1 = \frac{2\pi\nu}{c} \left[\frac{2\pi\nu'}{c} (1 - (ne)) - \frac{E_0}{\hbar c} \right]. \quad (20д)$$

Это выражение можно упростить с помощью комптоновского уравнения (1.2). Действительно, последнее гласит, если заменить в нём $\cos \vartheta$ на (ne) :

$$1 - (ne) = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} \right), \quad (20е)$$

благодаря чему (20д) переходит в

$$\frac{1}{2} D_1 = -\frac{2\pi\nu'}{c} \frac{E_0}{\hbar c}. \quad (20ж)$$

Теперь из (20г) и (20ж) получается:

$$D = \frac{\hbar c}{2E_0} [(\gamma n) + i\gamma_4] - \frac{ic}{4\pi\nu'} (1 + \gamma_4). \quad (21)$$

Аналогично, только в силу $k_0 = 0$ более простым путём, из (10) следует:

$$D'_0 = -\frac{\hbar c}{2E_0} [(\gamma e) + i\gamma_4] - \frac{ic}{4\pi\nu} (1 + \gamma_4). \quad (21а)$$

Следовательно, согласно (14) мы получаем:

$$[Fn] = \frac{\hbar c}{2E_0} \{(\gamma p)[\gamma e + i\gamma_4][\gamma n] + [\gamma n][(\gamma n) + i\gamma_4](\gamma p)\} + \dots \quad (22)$$

Обозначенные здесь многоточием члены возникают из вторых членов правых частей (21) и (21а) и содержат поэтому множитель $(1 + \gamma_4)$. Они обращаются в нуль, так как в (18) они умножаются слева на множитель

$$\bar{\psi}_0 \psi_0 = \frac{1 + \gamma_4}{4},$$

от которого отделены или множителем (γp) , или $-\gamma n$, а $1 + \gamma_4$ преобразуется при коммутировании с каким-либо из этих последних множителей в $1 - \gamma_4$.

Для дальнейшего упрощения выписанного в (22) матричного выражения необходимо совершить некоторые преобразования:

а) Первое произведение (γp) в фигурных скобках (22), можно перенести направо от $(\gamma e) + i\gamma_4$ с одновременным изменением знака; то же самое можно сделать и со вторым произведением $[\gamma n]$. Это следует из легко доказываемых формул:

$$(\gamma p)(\gamma e) + (\gamma e)(\gamma p) = 2(ep) = 0,$$

$$\gamma n + (\gamma n)[\gamma n] = 2[nn] = 0.$$

Тем самым фигурная скобка (22) принимает вид

$$\{ \dots \} = -[(\gamma e) + i\gamma_4](\gamma p)[\gamma n] - [(\gamma n) + i\gamma_4][\gamma n](\gamma p). \quad (23)$$

б) Очевидным образом

$$\begin{aligned}(\gamma p)\gamma &= p - [p\gamma]\tau, \\ \gamma(\gamma p) &= p + [p\gamma]\tau, \quad \tau = \gamma_{123}.\end{aligned}$$

Первую из этих формул можно применить к обоим последним множителям первого члена (23), вторую — к множителям второго члена. Таким образом, из (23) получается:

$$\{ \dots \} = - [(\gamma e) + i\gamma_4 + (\gamma n) + i\gamma_4] [pn] + (\gamma, e - n) [[p\gamma] n] \tau. \quad (24)$$

в) Заметим, что в силу (18) эта фигурная скобка заключена между $\bar{\psi}_0$ и ψ , и построим поэтому

$$\Psi = \bar{\psi}_0 \{ (\gamma e) + i\gamma_4 + (\gamma n) + i\gamma_4 \} \psi. \quad (25)$$

Для упрощения этого выражения выпишем ещё раз уравнения (20а), (20в), выражающие законы сохранения импульса и энергии, и помножим их почленно на выписанные слева множители:

$$\begin{aligned}\gamma c &\left| \begin{array}{l} \frac{h\nu}{c} e - \frac{h\nu'}{c} n = \hbar k, \\ h\nu - h\nu' = E - E_0. \end{array} \right.\end{aligned}$$

Складывая получающиеся результаты, приходим к

$$h\nu [(\gamma e) + i\gamma_4] - h\nu' [(\gamma n) + i\gamma_4] = \hbar c (\gamma k) + i\gamma_4 E - iE_0 - i\gamma_4 E_0 + iE_0. \quad (25a)$$

Члены $\pm iE_0$ добавлены здесь в правую часть из следующих соображений. В силу уравнения Дирака (2)

$$0 = \frac{i}{\hbar c} [\hbar c (\gamma k) + i\gamma_4 E - iE_0] \psi,$$

а в силу (3) для $k_0 = 0$

$$0 = \frac{i}{\hbar c} \bar{\psi}_0 (i\gamma_4 E_0 - iE_0).$$

Следовательно, если умножить (25а) слева на $\bar{\psi}_0$, а справа на ψ , что подсказывает (25), то правая часть пропадёт, и мы получим:

$$\bar{\psi}_0 [(\gamma e) + i\gamma_4] \psi - \bar{\psi}_0 [(\gamma n) + i\gamma_4] \psi = 0. \quad (25б)$$

Если написать ещё

$$\nu = \frac{\nu + \nu'}{2} + \frac{\nu - \nu'}{2}, \quad \nu' = \frac{\nu + \nu'}{2} - \frac{\nu - \nu'}{2},$$

то (25б) перейдёт, если мы учтём значение Ψ из (25), в

$$\frac{\nu + \nu'}{2} \bar{\psi}_0 (\gamma, e - n) \psi + \frac{\nu - \nu'}{2} \Psi = 0.$$

Отсюда получается упрощённый вид выражения для Ψ :

$$\Psi = \frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} \bar{\psi}_0 (\gamma, n - e) \psi. \quad (25в)$$

г) Образует теперь в соответствии с (24) и (25) выражение

$$\bar{\psi}_0 \{ \dots \} \psi = -\Psi [pn] - \bar{\psi}_0 (\gamma, n - e) [[p\gamma] n] \tau \psi.$$

Тогда, в силу (25в) и (22), получится:

$$\bar{\psi}_0 [Fn] \psi = -\frac{\hbar c}{2E_0} \bar{\psi}_0 (\gamma, n - e) \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} [pn] + [[p\gamma] n] \tau \right) \psi.$$

Сопряжённым выражением будет:

$$\bar{\psi} [\bar{F}n] \psi_0 = \frac{\hbar c}{2E_0} \bar{\psi} \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} [pn] - [[p\gamma] n] \tau \right) (\gamma, n - e) \psi_0.$$

и, согласно (18), произведение обоих даёт:

$$\Phi = -\left(\frac{\hbar c}{2E_0} \right)^2 \bar{\psi} \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} [pn] - [[p\gamma] n] \tau \right) \dots \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} [pn] + [[p\gamma] n] \tau \right) \psi. \quad (26)$$

Обозначенные здесь многоточием средние множители представляют собой выражение

$$(\gamma, n - e) \psi_0 \bar{\psi}_0 (\gamma, n - e).$$

В силу (19) оно оказывается равным

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} (\gamma, n - e) (1 + \gamma_4) (\gamma, n - e) &= \frac{1}{4} (\gamma, n - e)^2 (1 - \gamma_4) = \\ &= \frac{1}{4} (n - e)^2 (1 - \gamma_4) = \frac{1}{2} [1 - (ne)] (1 - \gamma_4). \end{aligned}$$

Поэтому мы можем написать вместо (26) $[(1 - \gamma_4)$ перестановочно с последующим множителем]:

$$\Phi = -\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar c}{E_0} \right)^2 \bar{\psi} \left\{ \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} \right)^2 [pn]^2 - [[p\gamma] n]^2 \tau^2 \right\} (1 - \gamma_4) [1 - (ne)] \psi. \quad (26a)$$

Здесь можно упростить второй член в фигурных скобках. Так как $\tau^2 = -1$, мы можем написать для него $[qn]^2$, где введено обозначение $q = [p\gamma]$. В общем случае для произвольного вектора q и единичного вектора n , в силу теоремы Пифагора, имеет место соотношение

$$q^2 = (qn)^2 + [qn]^2, \text{ следовательно, } [qn]^2 = q^2 - (qn)^2. \quad (26б)$$

Но в нашем случае, в силу соотношений между матрицами γ :

$$q^2 = [p\gamma]^2 = 2 |p|^2 = 2, \quad (26в)$$

$$(nq)^2 = (n[p\gamma])^2 = (\gamma [np])^2 = [np]^2, \quad (26г)$$

благодаря чему после повторного применения (26б)

$$(nq)^2 = p^2 - (np)^2 = 1 - (np)^2. \quad (26д)$$

Собирая результаты, получаем:

$$- [[p\gamma] n]^2 \tau^2 = 2 - 1 + (np)^2 = 1 + (np)^2.$$

Таким образом, (26) гласит окончательно:

$$\Phi = \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar c}{E_0} \right)^2 \left\{ \left(\frac{\nu + \nu'}{\nu - \nu'} \right)^2 [pn]^2 + 1 + (np)^2 \right\} [1 - (ne)] \bar{\psi} (\gamma_4 - 1) \psi. \quad (27)$$

Последний множитель нам хорошо известен. Именно, при правильной норми-

ровке волновой функции электрона отдачи [ср. (IV.5.47, 48)]

$$\bar{\psi}\gamma_4\psi = \Gamma, \quad \bar{\psi}\psi = \frac{E_0}{E} \Gamma,$$

где Γ — введённый в (IV.5.30) делитель нуля, который можно опустить. Таким образом, мы получаем, учитывая (20в):

$$\bar{\psi}(\gamma_4 - 1)\psi = \frac{E - E_0}{E} = \frac{\hbar(\nu - \nu')}{E}. \quad (27a)$$

После объединения с предпоследним множителем из (27) это выражение даёт благодаря соотношению Комптона (20е):

$$[1 - (ne)] \bar{\psi}(\gamma_4 - 1)\psi = \frac{E_0}{E} \frac{(\nu - \nu')^2}{\nu\nu'}. \quad (27б)$$

Тем самым (27) переходит в

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{8} \frac{E_0}{E} \left(\frac{\hbar c}{E_0}\right)^2 \left\{ \frac{(\nu + \nu')^2}{\nu\nu'} [pn]^2 + [1 + (np)^2] \frac{(\nu - \nu')^2}{\nu\nu'} \right\} = \\ &= \frac{1}{8} \frac{E_0}{E} \left(\frac{\hbar c}{E_0}\right)^2 \left\{ \left(\frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu}\right) ([pn]^2 + 1 + (np)^2) + 2([pn]^2 - 1 - (np)^2) \right\}. \end{aligned}$$

Это выражение можно упростить с помощью соотношения

$$[pn]^2 = 1 - (np)^2,$$

которое содержится в (26б), если мы обозначим, как и прежде, угол между p и n через Θ . Получаем:

$$\Phi = \frac{1}{4} \frac{E_0}{E} \left(\frac{\hbar c}{E_0}\right)^2 \left\{ \frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - 2 \cos^2 \Theta \right\}. \quad (28)$$

Нам следует ещё принять теперь во внимание, что в (17) мы должны были просуммировать по *всем* конечным состояниям вылетающего электрона. Интегрирование по k уже было выполнено в (17). Однако каждому k принадлежат две собственные функции, отвечающие противоположным направлениям спина. Суммирование по обоим направлениям спина приводит теперь, так как наш результат спина уже более не содержит, просто к возникновению множителя 2. Подстановка этого удвоенного значения Φ в (18а) приводит теперь непосредственно к формуле Клейна — Нишины для поляризованного излучения:

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{E_0 R}\right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 \left\{ \frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - 2 \cos^2 \Theta \right\}. \quad (29)$$

Для неполяризованного излучения надо заменить, как и в предыдущем параграфе [уравнения (30), (31)],

$$\sin^2 \Theta \quad \text{на} \quad \frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2},$$

следовательно,

$$2 \cos^2 \Theta \quad \text{на} \quad \sin^2 \vartheta,$$

где ϑ означает угол рассеяния (угол между e и n). Отсюда получается формула Клейна — Нишины для неполяризованного излучения:

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{E_0 R}\right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 \left\{ \frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - \sin^2 \vartheta \right\}. \quad (30)$$

Связь с результатами предыдущего параграфа мы сможем установить, если будем считать $\frac{\nu - \nu'}{\nu}$ малой величиной первого порядка. Тогда с точностью до членов второго порядка

$$\frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} = 2$$

и (29) перейдёт в (3.29), а (30) — в (3.31).

Первоначальную, приведённую Клейном и Нишиной, форму этого результата можно получить, если заменить в (29) и (30) ν' через ν с помощью уравнения Комптона (1.2):

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + \alpha(1 - \cos \vartheta)}, \quad \text{где } \alpha = \frac{h\nu}{mc^2} \quad (31)$$

(α не равно постоянной тонкой структуры!). Путём простого вычисления из (30) тогда получается:

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{E_0 R} \right)^2 \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \vartheta)]^3} \left\{ 1 + \cos^2 \vartheta + \alpha^2 \frac{(1 - \cos \vartheta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \vartheta)} \right\}. \quad (32)$$

Последняя формула окажется особенно удобной, если мы поставим себе целью перейти к вычислению *коэффициента рассеяния* σ , т. е. относительной потери энергии, которую испытывает падающее (неполяризованное) излучение из-за комптоновского процесса. Теряющаяся при этом энергия переходит отчасти в излучение ¹⁾ с изменённой частотой и частично в энергию электронов отдачи. В единичном акте первое излучение имеет энергию $h\nu'$, а электроны отдачи — $h(\nu - \nu')$, следовательно, полная потеря энергии составляет $h\nu$. Поскольку при вычислении S учитывалось только излучение фотонов с энергией $h\nu'$, то для получения полной потери энергии нам надо увеличить значение (32) для S в отношении $\frac{\nu}{\nu'}$. Поэтому мы получим коэффициент рассеяния σ , если проинтегрируем $\frac{\nu}{\nu'} S$ по сфере радиуса R :

$$\sigma = \int \frac{\nu}{\nu'} S d\omega; \quad d\omega = 2\pi R^2 \sin \vartheta d\vartheta. \quad (33)$$

Выполнение интегрирования даёт, если обозначить $x = \cos \vartheta$, $\xi = 1 + \alpha - \alpha x$:

$$\sigma = \frac{\pi e^4}{E_0^2} [J_1 + J_2 + \alpha^2 (J_3 - 2J_4 + J_5)], \quad (34)$$

где

$$J_1 = \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\xi^2} = \frac{1}{\alpha} \int_1^{1+2\alpha} \frac{dz}{z^2} = \frac{2}{1+2\alpha},$$

$$J_2 = \int \frac{x^2 dx}{\xi^2} = \frac{2}{\alpha^2} \frac{2 + 4x + x^2}{1 + 2x} - \frac{2(1+x)}{\alpha^2} \ln(1+2\alpha),$$

$$J_3 = \int \frac{dx}{\xi^3} = \frac{2(1+\alpha)}{(1+2\alpha)^2},$$

$$J_4 = \int \frac{x dx}{\xi^3} = \frac{2\alpha}{(1+2\alpha)^2},$$

$$J_5 = \int \frac{x^2 dx}{\xi^2} = \frac{2}{\alpha^2} \frac{1+\alpha}{(1+2\alpha)^2} (-1 - 2\alpha + \alpha^2) + \frac{1}{\alpha^2} \ln(1+2\alpha).$$

¹⁾ Не сопровождающееся изменением частоты релеевское рассеяние не играет для свободных электронов никакой роли (не уносит энергии), так как при этом

Подставляя эти значения в (34), получаем:

$$\sigma = \frac{2\pi e^4}{E_0^2} \left\{ \frac{\alpha + 1}{\alpha^2} \left[\frac{2(\alpha + 1)}{2\alpha + 1} - \frac{1}{\alpha} \ln(1 + 2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1 + 2\alpha) - \frac{3\alpha + 1}{(2\alpha + 1)^2} \right\}. \quad (34a)$$

Для $\alpha = 0$ путём предельного перехода получается известное значение (ср. т. I, (1.5.8)):

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{E_0^2}. \quad (34б)$$

На рис. 41 приведён график зависимости $\frac{\sigma}{\sigma_0}$ от α вместе с экспериментально полученными точками. Точка для $\alpha = 5,1$, $\lambda = 4,7 \text{ X}$ относится к монохрому-

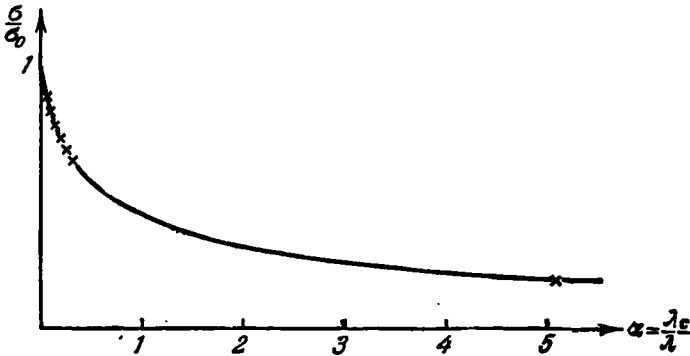


Рис. 41. Зависимость относительного коэффициента рассеяния $\frac{\sigma}{\sigma_0}$ от жесткости падающего излучения $\alpha = \frac{h\nu}{E_0} = \frac{\lambda_c}{\lambda}$. Сравнение с опытами с жесткими рентгеновскими лучами и с γ -лучами.

тичным γ -лучам ThC''¹⁾. Точки для $\alpha < 0,5$, полученные с жестким рентгеновским излучением, вычислены из старых наблюдений Хьюлета²⁾ и Комптона³⁾. В качестве рассеивающего материала использовался уголь. То же относится и к точке, полученной с ThC''. Для рассеивателей большего атомного номера наблюдается, по Мейтнер и Хупфелду, систематическое возрастание поглощения, которое обязано своим происхождением образованию пар (ср. гл. IV, § 10). Если бы мы вычисляли теоретическое значение для ториевой точки с помощью формулы (3.31) вместо формулы Клейна — Нишины, то расхождение с экспериментом превысило бы ошибки опыта.

не может выполняться закон сохранения импульса. Это было подчеркнуто в начале этого параграфа и будет подвергнуто подробному рассмотрению в следующем параграфе.

¹⁾ L. Meitner u. H. H. Nupfeld, Phys. Zs. 31, 947 (1930); Zs. f. Phys. 67, 147 (1931); G. T. R. Tarrant, Proc. Roy. Soc. 128, 345 (1930).

²⁾ C. W. Hewlett, Phys. Rev. 17, 284 (1921).

³⁾ A. H. Compton, там же 21, 500 (1923).

§ 5. ЭФФЕКТ КОМПТОНА НА СВЯЗАННЫХ ЭЛЕКТРОНАХ. АТОМНЫЙ ФАКТОР, СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ КОМПТОНОВСКИМ И РЕЛЕЕВСКИМ РАССЕЯНИЕМ

Возвратимся теперь к нерелятивистскому случаю и будем иметь в виду атом водорода (один электрон, шредингеровские собственные функции). Для свободного электрона вклад в рассеяние первого члена в токе (3.2) был равен нулю [ср. (3.34)], в случае связанного электрона этот вклад хотя и не будет точно равен нулю, однако будет всё же *малым* для слабой связи. Главным членом ¹⁾ попрежнему остаётся второй член в (3.2). Мы ограничим им наше рассмотрение и получим тем самым то преимущество, что сможем обойтись невозмущёнными собственными функциями u_0, u . При этом оказываются излишними вычисления по теории возмущений, которые и сами по себе (разложение по собственным функциям, резонансные знаменатели) были бы достаточно крепотливыми.

Итак, мы пишем, согласно (3.2) и (2.2):

$$\left. \begin{aligned} j &= \dots - \frac{e^2}{E_0} A u_0^* u, \\ u &= \psi e^{-i\omega t}, \quad u_0^* = \psi_0^* e^{i\omega_0 t}, \\ \omega &= + \frac{W}{\hbar}, \quad \omega_0 = - \frac{W_0}{\hbar}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где W_0 — энергия связи основного состояния дискретного спектра, в то время как W относится к непрерывному спектру. Для A мы воспользуемся представлением (4.5):

$$A = \frac{a}{2} p \left(e^{2i\pi\nu \left(t - \frac{er}{c} \right)} + e^{-2i\pi\nu \left(t - \frac{er}{c} \right)} \right). \quad (2)$$

Стоксова часть тока состоит из *первого* члена в A , и её зависимость от времени определяется множителем

$$e^{2\pi i\nu' t}$$

со следующим значением ν' :

$$h\nu' = h\nu - h(\omega - \omega_0) = h\nu - (W + W_0). \quad (3)$$

Содержащий зависимость от координат множитель будет равен (в отличие от ψ, ψ_0 действительна)

$$\psi_0 \psi e^{-2\pi i \frac{\nu}{c} (er)}.$$

Поэтому

$$j = \dots - \frac{e^2 a}{2E_0} p e^{2\pi i\nu' t} \psi_0 \psi e^{-2\pi i \frac{\nu}{c} (er)}. \quad (4)$$

Электрическое поле излучения для достаточно удалённой точки наблюдения получается отсюда с помощью (1.8.21). Компоненту, перпендикулярную к направлению излучения, мы получим, если заменим в (4) p на $|p_{\perp}| = \sin \theta$

¹⁾ Вентцель называет его «собственным», а опускаемый нами «несобственным» членом рассеяния и рассматривает второй как малую первого порядка по сравнению с первым. Ср. G. Wentzel, Hand. d. Phys. (Geiger — Scheel), XLIV, ч. 1, 2-е изд., стр. 770.

[ср. (3.5в)]. Следовательно,

$$E = \frac{e^2 a}{2E_0 R} \frac{2\pi i \nu'}{c} \sin \Theta \left\{ e^{2\pi i \nu' \left(t - \frac{R}{c} \right)} \int \psi_0 \psi' e^{2\pi i \tau} d\tau - \right. \\ \left. - e^{-2\pi i \nu' \left(t - \frac{R}{c} \right)} \int \psi_0 \psi'^* e^{-2\pi i \tau} d\tau \right\}, \quad (4a)$$

$$\eta = \left(-\frac{\nu}{c} \mathbf{e} + \frac{\nu'}{c} \mathbf{n}, r \right).$$

Добавление какого-либо множителя для обеспечения сходимости (размазывание по импульсам) оказывается здесь излишним, так как ψ_0 обеспечивает достаточно быстрое обращение в нуль на бесконечности координатного пространства (размазывание по импульсам обеспечивается здесь автоматически атомными движениями связанного электрона). Путём усреднения по времени, которое оставляет только член с удвоенным произведением, из (4a) следует:

$$\overline{E^2} = \left(\frac{e^2 a}{E_0 R} \right)^2 \frac{2\pi^2 \nu'^2}{c^2} \sin^2 \Theta \int \psi_0 \psi' e^{2\pi i \tau} d\tau \int \psi_0 \psi'^* e^{-2\pi i \tau} d\tau. \quad (4b)$$

Построим отношение среднего потока энергии $\overline{S} = \frac{c\overline{E^2}}{4\pi}$ к падающему потоку энергии \overline{S}_0 (3.20a):

$$\frac{\overline{S}}{\overline{S}_0} = \left(\frac{e^2 a}{E_0} \right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \frac{\sin^2 \Theta}{R^2} \int \psi_0 \psi' e^{2\pi i \tau} d\tau \int \psi_0 \psi'^* e^{-2\pi i \tau} d\tau. \quad (5)$$

В случае неполяризованного излучения вместо $\sin^2 \Theta$ возникает [ср., например, (3.30)]:

$$\frac{1 + \cos^2 \Theta}{2}. \quad (6)$$

До сих пор мы проводили вычисления с произвольно выбранной собственной функцией ψ непрерывного спектра, следовательно, с некоторым определённым значением энергии W и [ср. (3)] определённой частотой ν . Однако принципиально в комптоновском рассеянии участвуют все частоты ν' , которые совместны с уравнением (3). При этом в рассмотрении надо включить и энергетические уровни $W = -W_k$ дискретного спектра. Исключение составляет только основной уровень $W = -W_0$, $\nu' = \nu$ (ср. ниже). Мы получаем, таким образом, принципиально бесконечно протяжённый комптоновский спектр, частично непрерывного, частично дискретного характера. То, что, несмотря на это, практически дело ограничивается одной более или менее узкой линией, достигается за счёт быстрого убывания интегралов в (5) для всех значений ν' , заметно отличных от определённого оптимального значения (§ 6).

Мы должны поэтому просуммировать (5) по всем дозволенным (3) значениям ν' , и притом, как и ранее (ср., например, стр. 491), считая излучение некогерентным, так как испускание различных ν' происходит с независимыми фазами. При этом все точки шкалы частот войдут с одинаковым весом, так как мы нормируем собственные функции непрерывного спектра «на интервал ΔW ». Именно, мы потребуем, чтобы

$$\int d\tau \frac{1}{\Delta W} \int_{W_1}^{W_2} dW' \psi^*(W') \psi(W) = \{1; 0\}, \quad (7)$$

судя по тому, лежит ли W в интервале интегрирования $\Delta W = W_2 - W_1$ или нет (ср. примечание 2 на стр. 108). Так как в силу (3) шкала энергий связана со шкалой частот ν' линейным образом, то одинаковым ΔW будут соответствовать и одинаковые $\Delta \nu'$. Следовательно, при такой нормировке надо будет действительно приписывать всем интервалам шкалы частот одинаковые веса. Таким образом, мы приходим, исходя из (5), к суммарному излучению¹⁾:

$$S = \left(\frac{e^2}{E_0}\right)^2 \frac{\sin^2 \theta}{R^2} \left(\frac{\bar{\nu}}{\nu}\right)^2 \sum_{\nu'} \int f^* \psi_W d\tau \int f \psi_W^* d\tau, \quad (8)$$

где мы обозначили

$$f = \psi_0 e^{-2\pi i \bar{\nu} \tau}, \quad f^* = \psi_0^* e^{+2\pi i \bar{\nu} \tau}; \quad (9)$$

индекс W в (8) указывает на то, что ψ и ψ^* относятся к одному и тому же собственному значению W (одинаковые частоты) в равной степени и для непрерывного и для дискретного спектра.

Разлагая $\sum_{\nu'}$ на сумму по дискретному спектру и интеграл по непрерывному спектру, мы получаем:

$$\sum_{\nu'} = \sum_k' \int f^* \psi_k d\tau \int f \psi_k^* d\tau + \int_0^{\infty} \frac{dW}{\Delta W} \int f^* \psi_W d\tau \int f \psi_W^* d\tau. \quad (10)$$

Штрих у \sum означает, что основное состояние следует, как уже указывалось выше, исключить. В интегральной части мы скомпенсировали введение дифференциала dW знаменателем ΔW , причём, естественно, в конце вычисления должен быть проведён предельный переход $\Delta W = 0$.

Для того чтобы сразу выполнить теперь в (10) и суммирование и интегрирование, будем считать, что f и f^* разложены по полной системе собственных функций:

$$\left. \begin{aligned} f &= \sum A_k \psi_k + \int_0^{\infty} dW a_W \psi_W, \\ f^* &= \sum A_k^* \psi_k^* + \int_0^{\infty} dW a_W^* \psi_W^*. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Коэффициенты A вычисляются известным приёмом Фурье:

$$A_k = \int f \psi_k^* d\tau, \quad A_k^* = \int f^* \psi_k d\tau. \quad (12)$$

¹⁾ Суммирование в (8) распространяется на все рассеянные частоты ν' в пределах от частоты падающего излучения $\nu' = \nu$ и вплоть до $\nu' = 0$. При этом множитель ν'^2 , который, собственно говоря, должен был бы стоять под интегралом, надо рассматривать как усреднённое значение $(\bar{\nu})^2$, что, впрочем, несущественно из-за практически весьма малой ширины рассеянного спектра.

Далее в (9) фаза η заменена её средним значением и зависит, собственно говоря, от ν' [уравнение (4a)]; это несущественно для выполняемого далее суммирования. Это является законным, если измеренная в волновых числах ширина области заметного рассеяния мала по сравнению с обратной величиной атомного диаметра, ср. Вентцель (примечание на стр. 507), стр. 777.

Кроме того, в (10) верхний предел интегрирования по W заменён на $W = \infty$, в то время как в силу закона сохранения энергии (3) должно было бы быть $W = h\nu - W_0$. Так как, однако, в (10) речь идёт о сходящемся интеграле, то и эта ошибка несущественна для достаточно большого $h\nu$.

Чтобы получить соответствующее представление для a_W , помножим первое из уравнений (11) на ψ_W^* , $d\tau$, проинтегрируем по всем $d\tau$ и учтём ортогональность не только между дискретным и непрерывным спектром, но и между различными функциями непрерывного спектра. Получаем:

$$\int f \psi_W^* d\tau = \int d\tau \psi_W^* \cdot \int_{W_1}^{W_2} dW a_W \psi_W,$$

причём интервал $\Delta W = W_2 - W_1$ включает в себя значение $W = W'$. Но, согласно содержащемуся в (7) условию нормировки, правая часть последнего равенства равна $a_W \cdot \Delta W$. Если мы будем теперь ещё писать W вместо W' , то получим окончательно:

$$a_W = \frac{1}{\Delta W} \int f \psi_W^* d\tau \quad \text{и потому} \quad a_W^* = \frac{1}{\Delta W} \int f^* \psi_W d\tau. \quad (13)$$

Вычислим теперь из (11), учитывая ортогональность и нормировку:

$$\int f^* f d\tau = \sum A_k^* A_k + \int_0^\infty dW a_W^* \Delta W a_W \quad (14)$$

и подставим в правую часть выражения (12) и (13). Тогда мы получим правую часть (10) с той единственной разницей, что в (14) в сумму *включён* и основной уровень, который в сумме в (10) надо было *опустить*. Поэтому, если мы припишем основному уровню индекс $k=0$, то в качестве значения (10) получим:

$$\sum' = \int f^* f d\tau - A_0^* A_0. \quad (15)$$

Однако в силу определений (9)

$$\int f^* f d\tau = \int \psi_0^2 d\tau = 1,$$

а согласно (12)

$$A_0^* A_0 = \int \psi_0^2 e^{2i\pi\eta_0} d\tau \int \psi_0^2 e^{-2i\pi\eta_0} d\tau,$$

где η_0 — то значение η , которое получается из (4а) для $v' = v$, т. е.

$$\eta_0 = \frac{v}{c} (n - e, r). \quad (16)$$

В силу (15) теперь получается:

$$\sum' = 1 - \left| \int \psi_0^2 e^{2i\pi\eta} d\tau \right|^2$$

и согласно (8)

$$S_0 = \left(\frac{e^2}{E_0} \right)^2 \frac{\sin^2 \Theta}{R^2} \left(\frac{\sqrt{v}}{v} \right)^2 \left(1 - \left| \int \psi_0^2 e^{2i\pi\eta} d\tau \right|^2 \right). \quad (17)$$

Индекс S отмечает, что это выражение относится к комптоновскому рассеянию (некогерентному рассеянию с изменённой частотой)¹⁾. Наоборот, *релеев-*

¹⁾ В уравнении (17) нельзя совершить переход к случаю свободного электрона, просто положив $\psi_0 = 0$; хотя мы и получили бы при этом уравнение, имеющее форму (3.29), но с неверной степенью $\frac{v}{c}$. Причина лежит в сделанных в настоящем расчёте пренебрежениях, особенно в усреднении η ; ср. примечание на стр. 509.

ское рассеяние (когерентное рассеяние с неизменной частотой) мы будем обозначать в отличие от первого индексом R . Заметим ещё, что оба первых множителя в (17) образуют, как это уже упоминалось в связи с (2.32), выражение классической формулы рассеяния Герца и Томсона:

$$S_{кл} = \left(\frac{e^2}{E_0} \right)^2 \frac{\sin^2 \Theta}{R^3}. \quad (18)$$

Мы хотим теперь вычислить и релеевское или когерентное рассеяние, при котором конечное состояние ψ совпадает с начальным состоянием ψ_0 . Поскольку конечное состояние теперь фиксировано, предпринятое в (8) суммирование отпадает, и мы можем получить выражение для S_R непосредственно из (5), полагая в нём $\nu' = \nu$ и $\eta = \eta_0$ из (16):

$$S_R = \left(\frac{e^2}{E_0} \right)^2 \frac{\sin^2 \Theta}{R^3} \left| \int \psi_0^2 e^{2i\pi\eta} d\tau \right|^2. \quad (19)$$

Если положить теперь в (17)

$$\frac{\bar{\nu}}{\nu} = 1, \quad (20)$$

что является хорошим приближением для обычных рентгеновских лучей (но не для γ -лучей), то мы получим из (18) и (20) любопытное соотношение:

$$S_R + S_C = S_{кл}, \quad (21)$$

которое особенно подчёркивается Вентцелем (см. примечание на стр. 480). Итак, вычисленное с помощью волновой механики полное рассеяние, релеевское + комптоновское, совпадает с классически вычисленным полным рассеянием.

Рассмотрим теперь входящий в (17) и (19) интеграл, который мы будем называть *атомным фактором* и обозначать через F :

$$F = \int \rho e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (\mathbf{n} - \mathbf{e}, \mathbf{r})} d\tau. \quad (22)$$

Мы подставили здесь для η_0 его значение (16), а для $\psi_0^2 = \rho$ — плотность заряда в основном состоянии.

Обозначим угол между \mathbf{n} и \mathbf{e} («угол рассеяния») через ϑ и введём, как и на рис. 24 на стр. 338, полярную ось A , параллельную направлению $\mathbf{n} - \mathbf{e}$. От направления этой оси мы будем отсчитывать угол α , а вокруг этой оси — угол β , так что α и β будут обозначать полярные координаты радиуса-вектора интегрирования \mathbf{r} (22). Получим тогда:

$$|\mathbf{n} - \mathbf{e}| = 2 \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (\mathbf{n} - \mathbf{e}, \mathbf{r}) = 2 \sin \frac{\vartheta}{2} r \cos \alpha,$$

$$d\tau = r^2 dr \sin \alpha d\alpha d\beta,$$

$$F = \int \int \int \rho e^{i\pi r \cos \alpha} r^3 dr \sin \alpha d\alpha d\beta, \quad (23)$$

где

$$x = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (23a)$$

Выполнение интегрирования по α , если мы примем, что ρ , как в основном состоянии атома водорода, не зависит от α , даёт:

$$\int_0^\pi e^{i\pi r \cos \alpha} \sin \alpha d\alpha = \frac{e^{i\pi r} - e^{-i\pi r}}{i\pi r} = 2 \frac{\sin \pi r}{\pi r}. \quad (236)$$

Остающийся двукратный интеграл по r и по β можно переписать опять в виде трёхкратного интеграла по $d\tau$, причём возникший в последней строчке множитель 2 снова пропадёт из-за

$$\int_0^\pi \sin \alpha d\alpha = 2.$$

Итак, мы получим в качестве определения атомного фактора

$$F = \int \rho \frac{\sin \kappa r}{\kappa r} d\tau. \quad (24)$$

Отношение выражений (17) и (19) можно теперь просто выразить с помощью этого F :

$$\frac{S_C}{S_R} = \left(\frac{\bar{v}}{v}\right)^2 \frac{1 - F^2}{F^2}. \quad (25)$$

Это отношение справедливо для одноэлектронной задачи в водороде. Как обобщается эта формула на случай многоэлектронной задачи? Пронумеруем электроны числами от 1 до Z и вспомним, что в случае *релеевского* рассеяния Z электронов излучают *когерентно*, а в случае *комптоновского* рассеяния — *некогерентно*. Поэтому, вычисляя суммарное рассеяние, мы должны заменить в числителе (25)

$$1 - F^2 \quad \text{на} \quad \sum_1^Z (1 - F_n^2) = Z - \sum_1^Z F_n^2,$$

в знаменателе же, наоборот,

$$F^2 \quad \text{на} \quad \left(\sum_1^Z F_n\right)^2.$$

При этом (25) перейдёт в

$$\frac{S_C}{S_R} = \left(\frac{\bar{v}}{v}\right)^2 \frac{Z - \sum F_n^2}{\left(\sum F_n\right)^2}. \quad (26)$$

Эта формула была подвергнута тщательной опытной проверке¹⁾ для азота, кислорода и аргона²⁾. При этом для теоретического вычисления F_n использовался весьма точный метод Хартри. Сравнение теории с опытом дано на рис. 42. Как мы видим, согласие является полным. Удовлетворительные результаты даёт и более схематическая модель Томаса — Ферми³⁾.

Одновременно этот рисунок убедительно подтверждает высказанное в начале этой главы (стр. 480) утверждение, что комптоновское рассеяние характерно для свободных электронов, а релеевское рассеяние, напротив, невозможно для свободных электронов и вызывается связью между электроном и ядром, с помощью которой достигается выполнение баланса импульса. Действительно,

¹⁾ E. O. Wollan, Phys. Rev. 43, 955 (1933); ср. также Rev. Mod. Phys. 4, 205 (1902).

²⁾ В случае аргона в числителе (26) нужно ввести выведенную Валлером (см. сноску на стр. 480) поправку, на которой мы не будем здесь останавливаться.

³⁾ P. Debye, Phys. Zs. 31, 419 (1930); W. Heisenberg, там же 32, 737 (1931) и примыкающие таблицы Bewilouqua. Из вычислений Гайзенберга получается, что наше представление эффекта Комптона требует введения поправки, так что в числителе (26) оказывается не в точности тот же множитель F_n , что в знаменателе. Ср. также и предыдущее примечание.

наш рисунок показывает, что в пределе $Z \rightarrow 0$ (свободный электрон) релеевское рассеяние исчезающе мало по сравнению с комптоновским, в то время как при больших Z , наоборот, превосходит его.

Поляризацию комптоновского рассеяния можно получить из формулы (4а), которая остаётся справедливой и для случая релеевского рассеяния, если положить в ней $\nu' = \nu$. В обоих случаях векторный характер излучения определяется вектором \mathbf{p}_\perp . Если падающее излучение полностью поляризовано, то полностью поляризованы и рассеянные комптоновское или релеевское излучения; при не полной поляризации оба рассеянных излучения поляризованы, вообще говоря, в одинаковой степени, однако если наблюдение производится под прямым углом ($\vartheta = \frac{\pi}{2}$) к направлению падающего излучения, то из общих соображений волновой оптики следует, что и для неполяризованного первичного излучения оба вторичных излучения будут полностью поляризованы.

Экспериментальная проверка этого утверждения была предпринята в опытах Кальмана и Марка ¹⁾, которые сравнивали интенсивности смещённой и несмещённой линий в окрестности угла $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, после того как обе были отражены от одного и того же кристалла. При этом получилось, что отношение интенсивностей постоянно, т. е. что поляризация одинакова. Эти измерения проводились с помощью классического метода Баркла (ср. т. I, гл. I, § 5).

То, что угол полной поляризации всегда совпадает с $\frac{\pi}{2}$, было показано Барнетом и Бёрдином ²⁾ под руководством Комптона.

Гораздо более сложным, чем развитая здесь теория, является релятивистское рассмотрение эффекта Комптона на связанных электронах; в первую очередь здесь шла бы речь о получении аналога формулы Клейна—Нишны для простейшего случая атома водорода. Это удалось, однако, выполнить лишь приближённо ³⁾.

§ 6. ШИРИНА И ФОРМА КОМПТОНОВСКОЙ ЛИНИИ

С самого начала ясно, что в случае связанных электронов законы сохранения как энергии, так и импульса должны выполняться лишь с некоторой *неточностью*. В случае импульса это происходит из-за того, что электрон отдачи обладает до соударения некоторым неопределённым по величине и направлению начальным импульсом, который входит в баланс импульсов. Для энергии эта неточность возникает, несмотря на точное определение начальной энергии, из-за того, что в неё входит энергия электрона отдачи в конечном состоянии, которая исключается с помощью закона сохранения импульса (ср. т. I, гл. I, § 7).

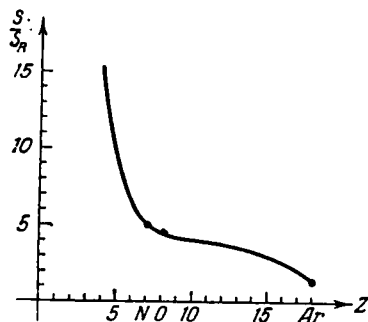


Рис. 42. Отношение комптоновского рассеяния к релеевскому. Сплошная кривая — теоретическая. Опытные точки из работы Уоллена для N, O и Ar.

¹⁾ H. Kallmann u. H. Mark, Zs. f. Phys 36, 120 (1926).

²⁾ C. S. Barnett a. J. A. Bearden, Phys. Rev. 23, 352 (1927).

³⁾ H. Casimir, Helv. Phys. Acta 6, 287 (1933); ср. также W. Pauli, там же, стр. 279; W. Franz, Zs. f. Phys. 90, 623 (1934); 95, 652 (1935).

Для того чтобы определить эту неточность количественно, мы обратимся к (5.5). Из этого уравнения следует, что относящееся к определённому ν' излучение пропорционально квадрату абсолютной величины интеграла

$$J = \int \psi_0 \psi_0^* e^{2i\pi\eta} d\tau. \quad (1)$$

Опуская нормировочные множители, которые несущественны для вычисления формы комптоновской линии, положим

$$\psi_0 \sim e^{-\frac{r}{a}}, \quad \psi \sim e^{i(kr)}. \quad (2)$$

Вид (1) указывает, что существенными являются только значения $r < a$; для больших r ψ_0 экспоненциально убывает, поэтому неправильный выбор ψ в этой области окажет слабое влияние на результат. Мы получили ранее (VII.2.4) точное выражение для собственных функций электронов отдачи в атоме водорода; кроме экспоненты $e^{i(kr)}$, которая характерна для свободного электрона, оно содержит ещё и функцию Лагерра L , которая описывает связь электрона. Но для $r=0$ последняя обращается в единицу. Поэтому для наших настоящих целей мы можем ограничиться для ψ простым выражением (2).

Согласно (1) и (2) получаем:

$$J = \int e^{-\frac{r}{a} + i(kr) + 2i\pi\eta} d\tau. \quad (3)$$

Этот интеграл вычисляется элементарно, если ввести для r и k полярные координаты r, α, β и k, α', β' , направляя полярную ось, как и на стр. 338, по направлению вектора

$$\mathbf{q} = \frac{2\pi}{c} (\nu\mathbf{e} - \nu'\mathbf{n}). \quad (4)$$

Находим тогда

$$J = \frac{8\pi a^3}{[1 + a^2(q^2 + k^2 - 2qk \cos \alpha')]^2}. \quad (5)$$

Квадрат J (J оказалось действительным) мы должны подставить в формулу (5.5) для интенсивности излучения. Тогда умноженная на $d\Omega' = \sin \alpha' d\alpha' d\beta'$ эта формула будет соответствовать части излучения, отвечающей элементарному процессу, при котором электрон отдачи попадает в элемент телесного угла $d\Omega'$. Мы интересуемся полным излучением в интервале частот $d\nu'$ и должны поэтому проинтегрировать по $d\Omega'$, т. е. образовать

$$S = \int J^2 d\Omega', \quad (6)$$

оставляя при интегрировании k постоянным, так как, согласно (5.3), каждой частоте ν' непрерывного спектра отвечает определённое значение k [входящая в (5.3) кинетическая энергия пропорциональна k^2]. Находим без труда:

$$S = \frac{64\pi^3}{3} \frac{a^4}{qk} \left\{ \frac{1}{[1 + a^2(q-k)^2]^3} - \dots \right\}. \quad (7)$$

Невыписанный член, который отвечает нижнему пределу $\cos \alpha' = -1$ и может быть поэтому получен из выписанного заменой $q-k$ на $q+k$, можно опустить. Из (7) видно, что максимум интенсивности лежит при $k=q$. Но, согласно (5), $k=q$ тогда приводит к максимуму J , когда $\alpha'=0$. Но $\alpha'=0$ означает совпадение направлений обоих векторов k и q . Так как их

длины также равны ($k = q$), то отсюда следует векторное равенство $k = q$, которое означает, согласно (4), закон сохранения импульса для свободных электронов. Итак, главный вклад в максимум интенсивности (7) вносят такие электроны, для которых почти выполняется закон сохранения импульса для свободных электронов. К учёту влияния связи на положение максимума мы вернёмся ниже.

Значение (7) при $k = q$ составляет:

$$S_{\text{макс}} = \frac{64\pi^3}{3} \frac{a^4}{q^2}. \quad (8)$$

Сравнение его с (7), если обозначить $\Delta k = \pm(k - q)$ и положить $\frac{k}{q}$ приближенно равным единице, приводит к

$$\frac{S}{S_{\text{макс}}} = \frac{1}{[1 + (a\Delta k)^2]^3}. \quad (9)$$

Поставим теперь вопрос о полуширине комптоновской линии, т. е. о таких значениях Δk , для которых

$$\frac{S}{S_{\text{макс}}} = \frac{1}{2}. \quad (10)$$

Из (9) мы получим:

$$a\Delta k = \sqrt[3]{\sqrt{2} - 1} = \pm 0,51. \quad (10a)$$

Это сразу даёт полуширину в шкале волновых векторов электрона отдачи. Чтобы перевести её в шкалу частот рентгеновского излучения, мы должны возвратиться к (5.3). Согласно этому уравнению при постоянных ν и W_0

$$\Delta\nu' = -\frac{\Delta W}{h},$$

следовательно, так как $W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$,

$$\Delta\nu' = -\frac{\hbar}{2\pi m} k \Delta k. \quad (10б)$$

В силу (10a) отсюда следует, если мы, как и ранее, положим $k \sim q$:

$$\Delta\nu' = \pm \frac{\hbar}{2\pi m} \frac{0,51}{a} q. \quad (10в)$$

Теперь, в силу (4),

$$q = \frac{2\pi}{c} \sqrt{v^2 + v'^2 - 2vv' \cos \theta},$$

или, если мы положим $v' \sim v$,

$$q = \frac{2\pi v}{c} \sqrt{2 - 2 \cos \theta} = \frac{4\pi v}{c} \sin \frac{\theta}{2},$$

откуда, согласно (10в),

$$\frac{\Delta\nu'}{\nu} = \pm \frac{2\hbar}{mc} \frac{0,51}{a} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (10г)$$

Наше вычисление относилось пока только к водородному атому, для которого работа ионизации электрона отдачи составляет $W_0 = \frac{e^2}{2a}$. Мы

перейдём к другим атомам, если просто заменим в (10г) $\frac{1}{a}$ на $\frac{2W_0}{e^2}$, где W_0 должно означать работу ионизации для произвольного атома. Одновременно мы перейдём от шкалы частот ν к шкале длин волн λ и обозначим полуширину в этой шкале через $\Delta\lambda$. Получаем:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \mp \frac{4\hbar c}{e^2} \frac{W_0}{mc^2} 0,51 \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Здесь $\frac{\hbar c}{e^2} = 137$ означает обратное значение постоянной тонкой структуры; поэтому

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \mp 279 \frac{W_0}{E_0} \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Итак, полуширина комптоновской линии составляет:

$$2\Delta\lambda = 558 \frac{W_0}{E_0} \lambda \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (11)$$

Следовательно, она должна расти:

- 1) пропорционально длине волны падающего излучения при постоянном угле рассеяния;
- 2) пропорционально синусу половины угла рассеяния при постоянной длине волны.

Оба эти закона были с большой точностью подтверждены в выполненных Дю-Мондом¹⁾ многолетних трудных измерениях. Особенно поучительным является то, что сам Дю-Монд вывел эти законы, исходя из классических представлений об эффекте Доплера на электронах, движущихся в атоме в смысле волномеханически дополненной боровской модели. Потребовавшиеся для этого вычисления оказались, несмотря на их элементарный характер, более сложными и длинными, чем наш волномеханический расчёт. Эти расчёты весьма поучительным образом показывают, что волновая механика имеет смысл статистики неизвестных по отдельности электронных орбит и является, следовательно, закономерным *продолжением* старых представлений, а не их *опровержением*.

Наконец, в соответствии с (11) мы устанавливаем, что ширина линии

- 3) должна возрастать пропорционально энергии связи W_0 рассеиваемого электрона в рассматриваемом атоме.

Измерения Дю-Монда не дают, однако, подтверждения этого утверждения, так как в них использовался в качестве рассеивателя в основном графит.

Ниже мы познакомимся с доказательствами и этого следствия из теории. В то же время было бы ошибочным принять, что ширина комптоновской линии должна была бы вследствие этого систематически нарастать с ростом *атомного номера* рассеивателя, так как энергия связи внешних электронов ни в коей мере не растёт вместе с атомным номером элемента, но остаётся примерно постоянной по столбцам периодической системы (для щелочных металлов даже убывает в ряду от Li до Cs). И в самом деле, старые наблюдения Ву²⁾ при помощи ионизационной камеры, выполненные с большим количеством различных рассеивателей (от Li до Cu), и фотографии

¹⁾ См. в особенности обзор в Rev. Mod. Phys. 5, 19 (1933). Прежние работы, частично выполненные совместно с Киркпатриком, опубликованы в Phys. Rev. в 1929 и 1931 гг. См. также E. O. Wollan, Phys. Zs. 35, 353 (1934).

²⁾ A. H. Compton and E. H. Wood, Proc. Nat. Akad. 10, 271 (1924); ср. также A. H. Compton, X-Rays and Electrons (X-лучи и электроны), стр. 268. Нью-Йорк, 1926.

Росса¹⁾ не указывают ни на какое уменьшение резкости линии с ростом атомного веса.

Выходя теперь за рамки специального рассмотрения вопроса о полуширине комптоновской линии, перейдём к обсуждению более общей задачи о форме комптоновской линии, которая представляется (на шкале волновых векторов k электронов отдачи) нашим уравнением (9). В основном то же самое представление сохраняется и в шкале длин волн λ рассеянного рентгеновского излучения. Именно, если мы введём:

$$x = \frac{\Delta\lambda}{\lambda l}, \quad (12)$$

где Δl означает рассмотренную в (11) полуширину, а $\Delta\lambda$ — разность длин волн относительно середины линии (точка максимальной интенсивности), то мы можем написать вместо (9):

$$\frac{S}{S_{\text{макс}}} = \frac{1}{[1 + (\sqrt[3]{2} - 1)x^2]^3}. \quad (13)$$

Как и должно было быть, для $x = 0$ отсюда получается $S = S_{\text{макс}}$, а для $x = 1$ $S = \frac{1}{2} S_{\text{макс}}$ (ср. рис. 43).

В предыдущем изложении мы совершили большое число пренебрежений: заменили волновую функцию электрона отдачи ψ плоской волной (2), вычеркнули в правой части (7) второй член и т. д. Напротив, Шнайidt²⁾ провёл все вычисления для случая водорода точно, используя параболические координаты. Результат (рис. 6 работы Шнайidта) отличается от нашей формулы (9) только параллельным сдвигом всей кривой вдоль оси абсцисс, который переводит максимум линии из точки $k = q$ (9) в точку, отвечающую значению k , получающемуся из уравнения

$$1 + a^2 k^2 = a^2 q^2. \quad (14)$$

Этот сдвиг имеет следующее происхождение.

Уравнение $k = q$ определяет, согласно (4), сохранение импульса при пренебрежении связью. Мы сохраним это пренебрежение для момента соударения, но не для вычисления окончательного, лишь постепенно устанавливающегося состояния электрона отдачи. Мы хотим, следовательно, провести различие между волновым вектором k_0 электрона непосредственно после соударения и окончательным волновым вектором k на большом расстоянии от атома. Их связь можно получить из баланса энергии

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 - W_0,$$

где в правой части стоит первоначальная кинетическая энергия и разность энергий свободного и связанного электрона. Мы можем переписать это

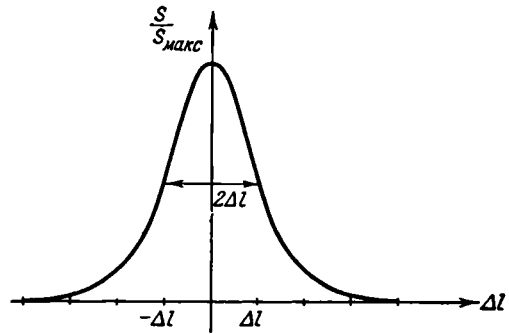


Рис. 43. Форма комптоновской полосы на шкале длин волн. $2\Delta l$ — полуширина, Δl — отклонение от середины полосы.

¹⁾ P. A. Ross Proc. Nat. Acad. 10, 304 (1924); равно как и А. Н. Сомптоп. цит. на стр. 516, стр. 269.

²⁾ Fritz Schnaidt, Diss. München, Ann. d. Phys. 21, 89 (1934).

уравнение, если умножим его на a^2 и положим $k_0 = q$, в виде:

$$a^2 k^2 = a^2 q^2 - \frac{2m}{\hbar^2} W_0 a^2. \quad (14a)$$

Второй член в правой части равен единице в силу хорошо известных соотношений, имеющих место для атома водорода

$$W_0 = \frac{e^2}{2a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}. \quad (14б)$$

Но тем самым (14a) совпадает с (14), и мы показали, что исправленное с помощью (14) положение максимума полностью укладывается в основные представления теории эффекта Комптона, так как следует из применения к процессу соударения законов сохранения энергии (учитывающего энергию связи) и импульса. Только после введения поправки (14) положения нашего максимума из (13) совпадет с комптоновским значением (1.1).

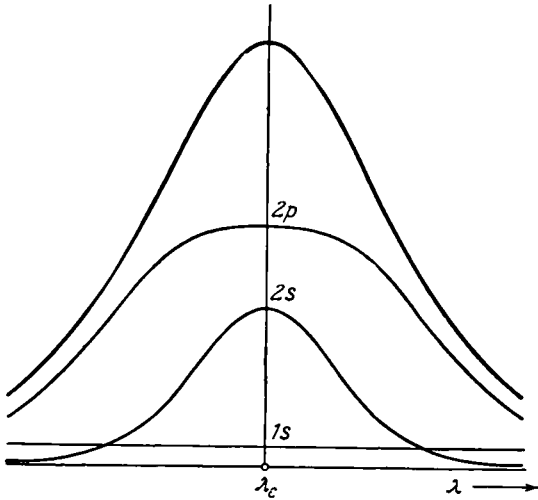


Рис. 44. Теоретическая форма комптоновской линии для неона по Буркхардту. Жириная кривая является суммой изображённых тонкими кривыми вкладов K -оболочки (кривая 1s) и L -оболочки (кривые 2s и 2p).

действительно наблюдалось Россом и Киркпатриком ¹⁾ для Ве и С и обсуждалось с теоретической стороны Блохом ²⁾.

Наше предыдущее рассмотрение положения и формы комптоновской линии относилось, как мы это неоднократно подчёркивали, к случаю водорода. Чтобы перейти к другим, легче поддающимся наблюдению атомам, нужно сложить вклады различных оболочек, заменяя при этом водородный радиус a на $\frac{a}{Z-s}$, где под s понимается относящаяся к рассматриваемой оболочке постоянная экранирования. Из утверждения 3) на стр. 516 мы уже знаем, что вклады от отдельных оболочек растут с увеличением связи оболочки. Мы покажем это на примере неона, используя вычисления Буркхардта ³⁾: K -электроны, обозначенные на рис. 44 как 1s, дают совершенно плоскую, распыляющуюся кривую соответственно их сильной связи. L -электроны (2s и 2p)

1) P. A. Ross and P. Kirkpatrick, Phys. Rev. 46, 668 (1934).

2) F. Bloch, там же 46, 674 (1934).

3) G. Burkhardt, Diss. München, Ann. d. Phys. 26, 567 (1936). Вычисления производились по методу Дю-Монда (см. выше) с помощью рассмотрения эффекта Доплера для движущихся K - и L -электронов, распределение которых по импульсам заимствовалось из шредингеровских собственных функций с постоянными экранирования, вычисленными Слетером [J. C. Slater Phys. Rev. 36, 57 (1930)].

требуют из-за разных постоянных экранирования отдельного рассмотрения. По оси абсцисс отложены длины волн, максимум соответствует комptonовской длине $\lambda = \lambda_c$.

На рис. 45 кривая II передаёт ту же самую теоретическую кривую рис. 44, а кривая III — результат соответствующего расчёта с собственными функциями Хартри—Фока. Кривая I, приведённая к одинаковому значению в максимуме, передаёт результаты опытного наблюдения формы линии у неона¹⁾. Она очень хорошо согласуется с теоретическими кривыми II и III.

Наоборот, кривая IV ведёт себя совершенно иначе. Она вычислена с помощью статистической модели Томаса—Ферми, в которой присутствуют внешние части электронного облака с исчезающе малой связью. Поэтому эта модель приводит к излишне резкой форме комptonовской линии. Чтобы сделать это особенно наглядным, нам следовало бы изобразить эту кривую на рисунке, приведя её не к равной интенсивности в максимуме, как то сделано со всеми кривыми, но к равной полной интенсивности (площади под кривой), которая, как то следует из результатов Гайзенберга и Бевилога (см. примечание 3 на стр. 512), правильно передаётся и при использовании метода Томаса—Ферми. Тогда возникла бы комptonовская линия в высшей степени высокой и острой формы, совершенно противоречащей опытной кривой I.

Форма комptonовских полос обладает ещё одной особенностью, которая привела бы, если бы её удалось обнаружить на опыте, к особенно ценным выводам относительно процесса отдачи. Именно вопреки предыдущим кривым комptonовская полоса должна была бы иметь «естественную границу» с коротковолновой стороны. Она получается из (5.3), если положить в нём $W = 0$ (кинетическая энергия электронов отдачи равна нулю). Если мы обозначим разность длин волн, отвечающих этой границе и релеевской линии, через $\Delta\lambda_g$, то упомянутое уравнение с $W = 0$ даёт:

$$\Delta\lambda_g = \frac{\lambda^2 W_0}{ch} \quad (15)$$

(λ — длина волны падающего излучения или длина волны релеевской линии). С другой стороны, для разности длин волн комptonовской линии (середины комptonовской полосы) и релеевской линии можно, как известно, написать:

$$\Delta\lambda_c = 2 \frac{h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (15a)$$

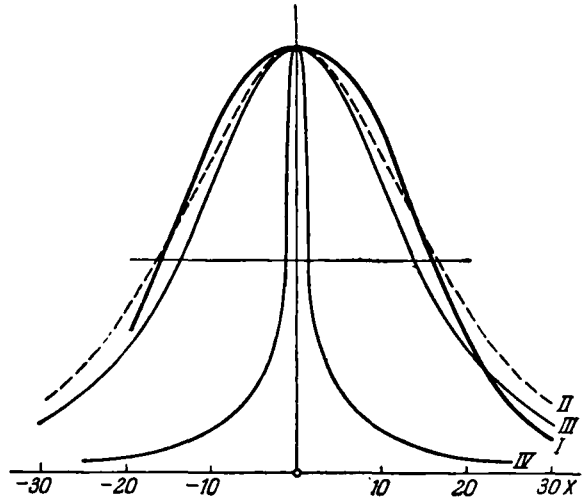


Рис. 45. Форма комptonовской линии для неона. Кривая I — опытная, по измерениям Капеллера для облучения K_{α} линией молибдена с $\lambda = 107,6X$. Кривые II, III и IV — вычисленные Буркхардтом. Угол рассеяния $\theta \sim 180^\circ$, максимум коротковолновой полосы при $\lambda = 756X$.

¹⁾ Н. Kappeller, Ann. d. Phys. 27, 129 (1936).

тем самым

$$\frac{\Delta\lambda_c}{\Delta\lambda_g} = \frac{2h^2}{mW_0} \left(\frac{\sin \frac{\vartheta}{2}}{\lambda} \right)^2 = \left(\frac{4\pi a}{\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2} \right)^2. \quad (16)$$

Для последнего преобразования были использованы соотношения (14б), которые приводят к тому, что последующие выводы опять относятся только к случаю водорода. Для того чтобы получить хорошее разрешение комптоновского и релеевского рассеяния, выбирают $\sin \frac{\vartheta}{2}$ возможно большим, следовательно, ϑ возможно более близким к π . Тогда последнее уравнение показывает, что

$$\Delta\lambda_g < \Delta\lambda_c \quad \text{для } \lambda < 4\pi a, \vartheta = \pi, \quad (16a)$$

т. е. для не слишком мягкого рентгеновского излучения (a равно $\frac{1}{2} \text{ \AA}$, следовательно, $4\pi a = 6 \text{ \AA}$). Рассматриваемая граница лежит в таком случае, как

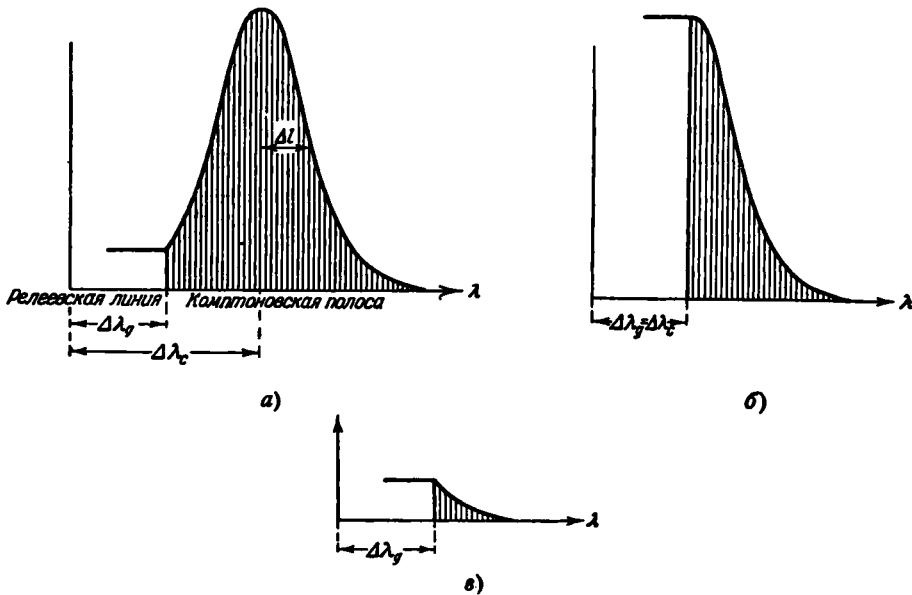


Рис. 46. а — Относительное положение релеевской линии и комптоновской полосы для больших углов рассеяния, $\Delta\lambda_g < \Delta\lambda_c$. б — Комптоновская полоса обрезается при подходящим образом выбранном угле рассеяния граничной длиной волны λ_g как раз посередине $\Delta\lambda_g = \Delta\lambda_c$. в — При очень малом угле рассеяния от комптоновской полосы остаётся лишь весьма незначительный хвост.

то показывает рис. 46 а, между релеевской линией и серединой заштрихованной на рисунке комптоновской полосы; относительно примыкающей не-заштрихованной полосы см. ниже.

Однако для рентгеновских лучей любой жёсткости можно выбрать такой угол ϑ , чтобы граница попала бы, например, в середину комптоновской линии, так, чтобы было, следовательно, $\Delta\lambda_g = \Delta\lambda_c$. Для К-линии меди, $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$, это произойдёт, если

$$\sin \frac{\vartheta}{2} = \frac{\lambda}{4\pi a} = \frac{1,5}{2\pi}, \quad \vartheta \sim 13^\circ,5. \quad (16б)$$

Тогда комптоновская линия должна наблюдаться обрезанной посередине, как это показано на рис. 46, б.

Для ещё меньших η или для больших λ граница g передвигается за середину полосы в сторону больших длин волн, и поэтому от комптоновской линии остаётся только небольшой остаток (рис. 46, в)¹⁾.

Что произойдёт с интенсивностью обрезанной таким образом комптоновской полосы? Мы знаем [уравнение (5.21)], что сумма интенсивностей релейевского и комптоновского рассеяний равна интенсивности классического томсоновского рассеяния. Мы знаем, далее, что при вычислении полного «комптоновского» рассеяния надо суммировать по всем собственным значениям *полной* системы собственных функций. Но к этой системе наряду с непрерывными принадлежат также *дискретные* собственные значения [уравнение (5.10)]. В то время как переход на уровень непрерывного спектра означает возникновение свободного электрона отдачи, переход на дискретный уровень означает, что электрон перешёл в более высокое связанное состояние. Так как для водорода n -е возбуждённое состояние обладает энергией

$$W_n = -\frac{W_0}{n^2},$$

то для таких процессов закон сохранения энергии (5.3) следует переписать в виде:

$$h\nu'_n = h\nu - (W_n + W_0) = h\nu - W_0 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right). \quad (17)$$

Это $h\nu'_n$ больше, чем $h\nu'$, соответствовавшее нашей границе g , которая отвечала ведь энергии $W = 0$. Следовательно, соответствующие длины волн излучения будут меньше, чем длина волны λ_g , и примыкают к последней с коротковолновой стороны. Поэтому непрерывная комптоновская полоса продолжается за g в виде ряда дискретных линий. На рис. 46а, б, в подчёркнуто, что это продолжение (ср. незаштрихованное продолжение заштрихованных комптоновских полос в левую сторону) происходит не только с непрерывным изменением длины волны, но и с непрерывно меняющейся *плотностью* энергии, если распределить содержащуюся в каждой линии конечную энергию на интервал между двумя такими соседними линиями. Тут следует сравнить замечания на стр. 113, где мы говорили об непрерывном переходе дискретного спектра водорода в непрерывный спектр.

Для того чтобы полностью прояснить положение вещей, нам надо ещё вспомнить рис. 23а на стр. 322, относившийся к комбинационному рассеянию в стоксовом случае. Энергия $h\nu$ падающего излучения переводит электрон из основного состояния в возбуждённое состояние, причём испускается квант света, энергия которого, обозначавшаяся там через $h\nu^*$, уменьшена по сравнению с $h\nu$ на энергию возбуждения электрона. Но это как раз и составляет смысл предыдущего уравнения (17). Мы можем таким образом сказать, что непрерывная комптоновская полоса продолжает с коротковолновой стороны дискретный спектр комбинационного рассеяния. Вычисленное в (5.17) излучение S_C состоит не только из комптоновского, но и из комбинационного излучения. Вкладом последнего в сумму (5.21) теоретически нельзя пренебрегать.

Возникает вопрос, можно ли и при каких условиях наблюдать на опыте обрыв комптоновской полосы и её продолжение в виде комбинационного

¹⁾ Собственно мы должны были бы говорить наоборот: середина комптоновской полосы с уменьшением длины волны переходит в силу (15а) по мере уменьшения η за границу g , длина волны которой сохраняется в силу (15) постоянной.

спектра. Этот вопрос рассматривался Францем¹⁾ с помощью численных и графических вычислений, и притом не только для водорода, но и для других, более удобных для опытного исследования атомов. Рассмотрение привело к тому выводу, что наблюдать комбинационный спектр едва ли возможно, однако, наблюдение обрыва комptonовской полосы безусловно возможно для соответствующих атомов под надлежащим образом выбранными углами. При этом для тяжёлых атомов следовало ожидать обнаружения не одной, но многих ступенчатых изменений интенсивности, отвечающих работам ионизации различных оболочек. Наиболее удобным углом оказывается не угол, соответствующий совпадению границы с серединой комptonовской линии (наибольшая интенсивность обрыва), как это можно было бы ожидать, исходя из рис. 46, б, но, вообще говоря, несравненно меньший угол.

В заключение мы хотели бы указать на наблюдения, впервые опубликованные Райем²⁾, которые сразу могли бы доказать наши утверждения с другой стороны³⁾. Речь идёт о прохождении рентгеновских лучей через тончайшие слои, например углерода, при котором с длинноволновой стороны первоначальной линии возникала новая линия, которая была «очень слабой, широкой и диффузной» и «на коротковолновом краю которой представлялись видимыми более или менее выдающиеся острые зубцы». Это описание напоминает наш рис. 46, в, который был характерен для очень малых углов рассеяния. Комptonовская полоса образовалась там границей g так, что оставался только очень небольшой остаток. Для углерода этот остаток должен был бы соответствовать K -электронам, а граница g — K -границе. (Гораздо более слабо связанные L -электроны должны были бы вносить вклад только в среднюю часть комptonовской полосы, которая для малых углов по существу совпадает с первоначальной линией.) С этим согласуется и то, что согласно Райю рассматриваемая линия сдвинута относительно первоначальной линии на частоту, соответствующую K_α -линии углерода, которая только немного должна отличаться от K -границы для того же элемента. Аналогичное смещение наблюдалось также для рассеяния на N и O. Мы могли бы поэтому (в противоположность Райю, который говорит об «частичном поглощении рентгеновских лучей») интерпретировать эти линии как остатки K -части комptonовской полосы.

Не исключено, что тщательное повторение этих опытов могло бы привести к положительному результату, если при их постановке будут учитываться развитые здесь теоретические представления.

1) W. Franz, *Ann. d. Phys.* **29**, 721 (1937); ср. также непосредственно предшествующую этой работе заметку автора.

2) B. B. Ray, *Zs. f. Phys.* **66**, 261 (1930), а так же работы R. C. Majumdar, S. Bargaва и J. B. Muckerjee в *Nature*, 1927.

3) J. M. Cork, *Phys. Rev.* **37**, 1555 (1931) и др.

ГЛАВА IX

СПЕКТР ГЕЛИЯ И МОЛЕКУЛА ВОДОРОДА. ПРОБЛЕМА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

§ 1. ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР

В старой квантовой теории задача построения модели *гелия* была источником ряда произвольных предположений и противоречий. Модель, выдвинутая Бором в 1913 г. (два электрона, обращающихся по одной и той же круговой орбите в одну сторону в диаметрально противоположных положениях), приводила к парамагнитному моменту в 2 магнетона. Предложенная в 1921 г. одновременно Бором и Кемблом модель (два электрона должны были обегать две наклонённые друг к другу на 60° круговые орбиты) приводила к парамагнитному моменту в 1 магнетон и оказалась, как показали более подробные вычисления Крамерса и ван Флека, нестабильной. Эти модели, равно как и предложенная автором в 1924 г. модель, приводившая, правда, к диамагнетизму, но в высшей степени искусственная, были подвергнуты в четвёртом издании I тома подробному обсуждению.

Волновая механика разделалась с этими трудностями одним ударом, причём оказалось достаточным прибегнуть к аналитической модели — волновому уравнению для двухэлектронной задачи. В своей основной работе 1926 г. Гейзенберг¹⁾ смог разгадать загадку двух систем термов для пара- и ортогелия. Паратермы оказались соответствующими *симметричным*, а орто-термы — *антисимметричным* решениям волнового уравнения (симметричным или антисимметричным в координатах обоих электронов).

Расщепление орто- и паратермов является проявлением (пользуясь сделавшейся классической терминологией Гейзенберга) *обменного эффекта*. Если мы пренебрежём в нулевом приближении взаимным отталкиванием электронов, то получим следующую пару решений, относящихся к одной энергии:

- а) электрон 1 в состоянии n , электрон 2 в состоянии m ;
- б) электрон 1 в состоянии m , электрон 2 в состоянии n .

Таким образом, в нулевом приближении получается *обменное вырождение*. Если прибегнуть к теории возмущений, чтобы снять это вырождение, то совпадавшие уровни энергии для случаев а) и б) расщепляются, и мы необходимым образом придём к построению их симметричной и антисимметричной комбинаций. В § 2 будет показано, что уже первое приближение теории возмущений приводит к качественно правильным значениям энергетических термов, хотя и недостаточно точным для сравнения со спектроскопическими измерениями.

¹⁾ W. Heisenberg, Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen (О спектрах атомных систем с двумя электронами), Zs. f. Phys. **39**, 499 (1926).

В § 3 тот же самый метод будет применён к двухэлектронной задаче *водородной молекулы*, которая, так же как и задача гелия, не поддавалась старой квантовой теории. Теория возмущений будет применена к случаю произвольного расстояния между обоими Н-ядрами и приведёт к возмущённой энергии как функции расстояния. При этом окажется, что только симметричная комбинация приводит к возникновению потенциальной ямы, следовательно, обеспечивает возможность равновесия обоих ядер, в то время как антисимметричная комбинация приводит к монотонно убывающей с расстоянием энергии взаимодействия, т. е. относится к случаю отталкивания ядер.

Этим результатом мы обязаны важной работе Гайтлера и Лондона¹⁾, которые разъяснили на этом пути проблему *химической связи* и свели её к обменному эффекту. Это объяснение переносится с молекулы водорода на все упомянутые гомеоплярные связи в таких молекулах, как O_2 , N_2 , и далее на гетерополярные связи в органической химии.

Как известно, Льюис предложил заменить простые валентные чёрточки (—) классической химии картиной пары электронов (:), которые являются общими для обоих связанных атомов, и соответственно двойную связь органической химии (например, $C=C$) символом двойной электронной пары (::). Мы видим теперь, что эта картина знаменательным образом предвосхитила волномеханическое представление о двух равноправных обменных электронах.

Часто говорят, что «обменные силы» являются якобы специфически квантовым явлением, не имеющим аналога в классической механике. Едва ли можно поддерживать такое утверждение, если принять во внимание хотя бы то, что Гейзенберг предпослал²⁾ своей посвящённой гелию работе рассмотрение связанных осцилляторов, в ходе которого он разъяснил возникающие при обменном вырождении соотношения на классическом примере расщепления первоначально совпадавшего уровня энергии обоих осцилляторов на два отдельных, один из которых отвечает симметричному, а другой антисимметричному колебанию полной системы. Коссель³⁾ заметил к этому, что, для того чтобы сделать аналогию полной, надо привлечь не обычную картину двух связанных маятников, но два индуктивно связанных электрических колебательных контура; тогда в полном соответствии с гомеоплярной связью возникнет электродинамическое притяжение обеих катушек при симметричном и отталкивание при антисимметричном собственном колебании.

Вычисления для случая молекулы H_2 , использующие «обменные интегралы», оказываются более трудоёмкими, чем в случае атома He, так как в первом случае невозмущённые собственные функции хуже удовлетворяют условиям задачи, чем во втором. (Лучше всего здесь подходили бы в качестве начальных функций собственные функции иона H_2^+ , но они были бы слишком неудобными для вычислений по теории возмущений.) Вычисление обменных интегралов было выполнено впервые, в завершение работы Гайтлера — Лондона, Сугиура⁴⁾; оно будет исчерпывающе изложено в § 4.

Различие между симметричными и антисимметричными состояниями получает своё полное теоретическое истолкование лишь тогда, когда мы привле-

¹⁾ Heitler u. London, Wechselswirkung neutraler Atome und homopolare Bindung nach der Quantenmechanik (Взаимодействие нейтральных атомов и гомеоплярная связь по квантовой механике), *Za. f. Phys.* 44, 445 (1927).

²⁾ W. Heisenberg, *Za. f. Phys.* 38, 441 (1926).

³⁾ W. Kossel, *Phys. Za.* 32, 172 (1931).

⁴⁾ Y. Sugiura, *Za. f. Phys.* 45, 484 (1927).

каем к нашему рассмотрению наряду с координатами частиц также и их спины. Мы могли бы дополнить тогда как симметричную в координатах, так и антисимметричную в координатах собственные функции надлежащей спиновой зависимостью либо до антисимметричной во всех переменных, либо до симметричной собственной функции.

На примере атома гелия видно, что в этом случае в природе осуществляется только антисимметричная система функций и что она не может комбинировать с симметричной.

Это высказывание, расширенное до общего постулата, составляет волномеханическую формулировку *принципа Паули*. Наше изложение в § 5 подчёркивает, что он не содержится в основных положениях волновой механики, но должен быть добавлен к ним на основе требований опыта. *Элементарное* понимание принципа Паули («в каждом полностью определённом квантовом состоянии может находиться один электрон») получается из волномеханической формулировки («собственная функция полной системы антисимметрична и координатах и спинах любой пары электронов»).

Учёт спиновой зависимости сразу даёт возможность сделать общий обзор мультиплетной структуры атомных термов: дублетов в случае *одного* валентного электрона, синглетов и триплетов в случае *двух*, дублетов и квартетов в случае *трёх* и т. д.

Вместе с числом валентных электронов возрастает и степень вырождения; возникающий при вычислении возмущённых собственных значений определитель будет иметь для N электронов порядок $N!$. Путь к общему исследованию мультиплетной структуры с помощью методов теории групп был указан в примыкающем к работе по He исследовании Гейзенберга¹⁾ и продолжен в работах Вигнера, Неймана, Гайтлера и др. Наше изложение будет ограничено случаем двух электронов.

В § 6 мы познакомимся, приняв во внимание спин протонов, с различием между орто- и параводородом. В этом случае речь идёт не о симметрии или антисимметрии по отношению к координатам электронов, как то было в предшествовавших параграфах, но о симметрии или антисимметрии по отношению к протонам.

Запрет комбинаций орто- и паратермов, равно как и отношение их статистических весов 3:1, объясняет поведение теплоёмкости водорода при низких температурах.

В § 7 мы рассмотрим ядра произвольного спина S , исходя из модели построения ядер из протонов и нейтронов. Параллельно различию целого и полуцелого S идёт различие между *статистикой Бозе* (симметричные собственные функции) и *статистикой Ферми* (антисимметричные собственные функции), где в обоих случаях речь идёт о зависимости от конфигурационных и спиновых координат ядра как целого, но не о его элементарных составных частях, для которых всегда имеет место *статистика Ферми*. Критерием для того, является ли спин целым или полуцелым, может служить чередование интенсивностей во вращательных полосах двухатомных, построенных из одинаковых ядер молекул.

В § 8 рассматриваются соударения между двумя одинаковыми ядрами: протон → протон, α -частица → α -частица и т. д., для которых становится существенным различие между статистикой Ферми и статистикой Бозе. Кроме того, эта задача демонстрирует весьма убедительным образом волновую природу частиц: наблюдения указывают на то, что частицы, т. е. соответствующие им волны, интерферируют друг с другом!

¹⁾ W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 41, 239 (1927).

§ 2. ОБМЕННОЕ ВЫРОЖДЕНИЕ В СПЕКТРЕ ГЕЛИЯ. ОРТО- И ПАРАСОСТОЯНИЯ

Волномеханической основой модели гелия является (ср. стр. 523) общее волновое уравнение для двух электронов:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(W - V)\Psi = 0, \quad \begin{cases} \Delta = \Delta_1 + \Delta_2, \\ V = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \end{cases} \quad (1)$$

где Δ означает дифференциальный параметр в шестимерном конфигурационном пространстве обоих электронов, который складывается аддитивно из обоих трёхмерных выражений Δ_1 и Δ_2 . Потенциальную энергию V мы записали в (1) для случая Z -кратно заряженного ядра; поэтому $Z = 2$ означает He, $Z = 1$ соответствует иону H^- (ср. гл. X, § 2), $Z = 3, 4, \dots$ — ионам Li^+, Be^{++}, \dots , наконец, r_{12} означает взаимное расстояние двух электронов, а r_1 и r_2 — их расстояния от ядра. Ядро мы будем считать закреплённым, т. е. обладающим бесконечной массой.

Шесть степеней свободы уравнения (1) будут описываться шестью полярными координатами:

$$r_1, \vartheta_1, \varphi_1; \quad r_2, \vartheta_2, \varphi_2. \quad (2)$$

Однако к внутренней конфигурации атома относятся только три степени свободы. Строение образуемого ядром и двумя электронами треугольника задаётся, например, тремя величинами:

$$r_1, r_2, \cos \Theta, \quad \Theta = \widehat{(r_1, r_2)}. \quad (2a)$$

Три остающиеся степени свободы относятся к ориентации треугольника в пространстве и могут быть отделены. Поэтому возможно свести уравнение (1) к уравнению только с тремя независимыми переменными аналогично тому, как производится сведение к меньшему числу степеней свободы в классической механике, например путём использования законов сохранения трёх компонент момента в отсутствии внешних сил. Согласно Гронвалю¹⁾ при этом удобно пользоваться тремя переменными s, φ и β , которые связаны с переменными (2a) следующими соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} s^2 &= \frac{r_1^2 + r_2^2}{4}, & s^2 \cos \beta &= \frac{1}{2} r_1 r_2 \sin \Theta, \\ s^2 \sin \beta \sin \varphi &= \frac{r_1^2 - r_2^2}{4}, & s^2 \sin \beta \cos \varphi &= \frac{1}{2} r_1 r_2 \cos \Theta. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Мы придём тогда к дифференциальному уравнению:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial s^2} + \frac{5}{s} \frac{\partial \Psi}{\partial s} + \frac{4}{s^2 \sin 2\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sin 2\beta \frac{\partial \Psi}{\partial \beta} \right) + \frac{4}{s^2 \sin^2 \beta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \left(W + \frac{4}{s} f \right) \Psi = 0, \quad (3)$$

где введено обозначение

$$f = [2(1 + \sin \varphi \sin \beta)]^{-\frac{1}{2}} + [2(1 - \sin \varphi \sin \beta)]^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2Z} [1 - \cos \varphi \sin \beta]^{-\frac{1}{2}}. \quad (3a)$$

¹⁾ T. N. Gronwall; опубликовано в работе J. N. Bartlett, Phys. Rev. 51, 655 (1937). Уравнение (3) написано в видоизменённых единицах Хартри и относится только к S-состоянию гелия.

Если бы уравнение (3) допускало разделение переменных, то мы могли бы перейти к точному интегрированию задачи гелия. Так как, однако, это обстоятельство не имеет места, то нам придётся удовольствоваться приближёнными способами, для которых уравнение в виде (1) приспособлено лучше, чем уравнение в виде (3).

Основной особенностью уравнения (1) является полная его симметрия в координатах обоих электронов, которые мы произвольно обозначили как «электрон 1» и «электрон 2». Эта симметрия сохранится, если мы пренебрежём в нулевом приближении взаимодействием $\frac{e^2}{r_{12}}$. Потенциальная энергия будет тогда равна

$$V = V_0 = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}. \quad (4)$$

Но тем самым уравнение (1) допускает разделение на два уравнения кеплеровой задачи. Собственные функции этих двух уравнений мы будем называть $\psi(1)$ и $\psi(2)$, а собственные значения $W(1)$ и $W(2)$. Энергия в нулевом приближении будет равна

$$W = W_0 = W(1) + W(2). \quad (4a)$$

Это собственное значение W_0 двухэлектронной системы является *вырожденным*¹⁾. Именно к нему относятся две полностью равноправные собственные функции

$$u = \psi_1(1)\psi_n(2) \quad \text{и} \quad v = \psi_1(2)\psi_n(1). \quad (5)$$

Индексы 1 и n здесь означают, что один из электронов находится на K -уровне атома гелия, а другой, вообще говоря, в другом, характеризующемся числом n состоянии. Функции u и v удовлетворяют одному и тому же волновому уравнению нулевого порядка:

$$L\left(\begin{matrix} u \\ v \end{matrix}\right) = 0, \quad L = \Delta + \frac{2m}{\hbar^2}(W_0 - V_0). \quad (6)$$

Исключением в смысле наличия вырождения является основное состояние гелия (оба электрона на K -уровне), так как тогда $n = 1$ и $u = v$.

Следствием «обменного вырождения» является тот факт, что наряду с функциями u и v уравнению (6) удовлетворяет также и бесконечное семейство функций

$$w = \alpha u + \beta v. \quad (7)$$

Нам нужно найти теперь те функции из этого семейства, которые непрерывно примыкают к возмущённым собственным функциям первого приближения. Мы привлечём для этого теорию возмущений (гл. V, § 1, Б), специализированную для случая однократного вырождения.

¹⁾ К обменному вырождению здесь добавляется ещё и известное из случая водорода вырождение в угловых переменных, поскольку к каждому заданному собственному значению $W(1)$ или $W(2)$ относится ещё n^2 различных водородных собственных функций ψ , которые отличаются друг от друга квантовыми числами l и m . Вырождение по l снимается взаимодействием обоих электронов одновременно с обменным вырождением; оно является $(n-1)$ -кратным, в то время как обменное вырождение будет 1-кратным. В дальнейшем нам не придётся иметь дело с l -вырождением. Нам не понадобится здесь обращать внимание на m -вырождение, которое снялось бы только при наложении магнитного поля.

Мы будем обозначать далее собственные функции и собственные значения первого приближения через Ψ и W и положим, как и в (V. 1.4a):

$$\Psi = \psi + \varphi, \quad W = W_0 + \varepsilon. \quad (8)$$

Подстановка в (1) даёт из-за $L(\psi) = 0$ в пренебрежении малых высшего порядка:

$$L(\varphi) = \frac{2m}{\hbar^2} (s - \varepsilon) \psi, \quad s = \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (9)$$

Правая часть этого неоднородного уравнения должна быть, согласно основной теореме теории возмущений на стр. 294, ортогональна к решениям однородного уравнения, следовательно, в частности, к u и v . Получаем:

$$\int \begin{Bmatrix} u^* \\ v^* \end{Bmatrix} (s - \varepsilon) \psi d\tau = 0, \quad (10)$$

где $d\tau = d\tau_1 d\tau_2$ — элемент объёма шестимерного конфигурационного пространства. Подставляя ψ из (7), получим два уравнения:

$$\left. \begin{aligned} \alpha \int (s - \varepsilon) u^* u d\tau + \beta \int (s - \varepsilon) u^* v d\tau &= 0, \\ \alpha \int (s - \varepsilon) v^* u d\tau + \beta \int (s - \varepsilon) v^* v d\tau &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

В соответствии с (V.1.20) введём обозначения:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{11} &\doteq \int s u^* u d\tau, & \varepsilon_{12} &= \int s u^* v d\tau, \\ \varepsilon_{21} &= \int s v^* u d\tau, & \varepsilon_{22} &= \int s v^* v d\tau \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

и заметим, что водородные собственные функции ψ_1 и ψ_n в (5) ортогональны друг к другу и могут считаться нормированными, так что

$$\int u^* u d\tau = 1, \quad \int v^* v d\tau = 1, \quad \int u^* v d\tau = 0, \quad \int v^* u d\tau = 0. \quad (13)$$

Учитывая ещё, что ε является постоянной, т. е. может быть вынесено за знак интеграла, мы сможем написать тогда вместо (12):

$$\left. \begin{aligned} \alpha (\varepsilon_{11} - \varepsilon) + \beta \varepsilon_{12} &= 0, \\ \alpha \varepsilon_{21} + \beta (\varepsilon_{22} - \varepsilon) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Исключение α и β приводит к квадратичному уравнению относительно ε :

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{11} - \varepsilon & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (15)$$

Заметим теперь, что v получается из u , следовательно, ε_{22} — из ε_{11} и ε_{21} — из ε_{12} путём обмена обоих электронов. Так как, однако, в отношении интегрирования по $d\tau$ оба электрона являются равноправными и так как s [ср. (9)] симметрично в обоих электронах, то должно быть

$$\varepsilon_{22} = \varepsilon_{11}, \quad \varepsilon_{21} = \varepsilon_{12}.$$

Следовательно, наше квадратное уравнение переходит в

$$(\varepsilon_{11} - \varepsilon)^2 = \varepsilon_{12}^2, \quad \varepsilon_{11} - \varepsilon = \pm \varepsilon_{12} \quad (15a)$$

и

$$\varepsilon = \varepsilon_{11} \mp \varepsilon_{12}. \quad (16)$$

Тем самым мы нашли собственное значение в первом приближении: двукратное в нулевом приближении собственное значение $W_0 = W(1) + W(2)$ расщепляется в первом приближении на два несколько различающихся значения:

$$W = W_0 + \varepsilon_{11} \mp \varepsilon_{12}. \quad (16a)$$

После того как ε найдено, из (11) можно получить отношение $\frac{\alpha}{\beta}$. Имеем:

$$\alpha \pm \beta = 0.$$

Подстановка в (7) даёт:

$$\omega = \alpha (u \mp v).$$

Значение α определяется из того требования, чтобы ω было нормированным на 1. Сразу получаем $1 = 2\alpha^2$, следовательно,

$$\omega = \frac{u \mp v}{\sqrt{2}}. \quad (17)$$

Это как раз и будут те два решения нулевого приближения, к которым непрерывно примыкает возмущённое решение. Как мы видим, особая роль «внутреннего электрона», которую мы приписали первому либо второму электрону в u или v , стирается в существенных для дальнейшого комбинациях ω ; ω построена таким образом, что она либо симметрична, либо антисимметрична в координатах обоих электронов.

Покажем теперь, что обе системы состояний, которые приближённо представляются выражениями (17), не могут комбинировать друг с другом. Для доказательства образуем матричный элемент M_{nm} какой-либо из координат $q = x, y, z$ для перехода из состояния $\frac{(u+v)_n}{\sqrt{2}}$ в состояние $\frac{(u-v)_m}{\sqrt{2}}$:

$$M_{nm} = \frac{1}{2} \int \int (q_1 + q_2)(u + v)_n^* (u - v)_m d\tau_1 d\tau_2. \quad (18)$$

Чтобы понять множитель $q_1 + q_2$, вспомним, что матричный элемент произведённый (ср. стр. 53) от электрического момента, который составляется аддитивно из моментов отдельных электронов.

Итак мы видим: оба первых множителя под знаком интеграла в (18) симметричны в координатах обоих электронов 1 и 2, а третий — антисимметричен. Следовательно, при обмене 1 и 2 у M_{nm} меняется знак. Но q_1 и q_2 являются просто переменными интегрирования, и поэтому их взаимная замена не может изменить численного значения M_{nm} , так как сводится к изменению обозначений переменных интегрирования. Следовательно, должно быть $M_{nm} = 0$. Согласно стр. 54 это означает, что переходы между двумя системами состояний запрещены.

Этот запрет указывает сейчас же на наличие двух не комбинирующих друг с другом систем термов *орто-* и *парагелия*. При этом является существенным, что этот запрет имеет место не только, как было здесь доказано, в нулевом приближении, но является точным, что следует из того, что чётность или нечётность сохраняется и при привлечении следующего приближения, т. е. функции φ из (8), и всех высших приближений. Мы отвлекаемся при этом от вращения электрона (спина). Его учёт приведёт к возникновению в случае гелия весьма слабых, а для тяжёлых атомов заметно более сильных интеркомбинаций обеих систем термов.

Какую же из двух систем функций (7) должны мы приписать орто-а какую парасостояниям? Мы утверждаем:

$$\left. \begin{array}{l} \text{симметричная система } (u+v), \text{ паратермы,} \\ \text{антисимметричная система } (u-v), \text{ ортотермы.} \end{array} \right\} \quad (19)$$

Для доказательства обратимся к рис. 92 первого тома. Он показывает, что основной терм $1s$ является парасостоянием, в то время как ортоспектр вообще не обладает состоянием типа $1s$, далее, что ортотермы nP, nD, \dots лежат несколько ниже паратермов nP, nD, \dots . С другой стороны, теоретически основным термом является, как мы замечали уже в связи с (5), терм с $n=1, u=v$. Но это значит, что для антисимметричной группы при этом будет $w=0$ в нулевом (и в старших) приближениях. Следовательно, антисимметричная система не обладает основным уровнем и должна быть отнесена поэтому к ортоспектру в соответствии с нашим утверждением (19). То же самое следует и из относительного положения симметричных и антисимметричных уровней. Именно (16а) совместно с (17) даёт:

$$\Delta W = W_{\text{симм}} - W_{\text{антисимм}} = +2\varepsilon_{12}. \quad (20)$$

Если записать в соответствии с (12), ε_{12} в виде:

$$\varepsilon_{12} = e^2 \iint \frac{\rho(1)\rho^*(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho(1) = \psi_1^*(1)\psi_n(1), \\ \rho^*(2) = \psi_1(2)\psi_n^*(2), \end{array} \right\} \quad (21)$$

то из известных теорем теории потенциала¹⁾ можно легко заключить, что ε_{12} всегда и для всех n должно быть положительно. Но согласно (20) отсюда следует, что все симметричные термы лежат выше, чем антисимметричные. Это обстоятельство также приводит к сопоставлению (19).

Третий критерий основывается на структуре термов: паратермы оказываются как по опытным данным, так и согласно нашим теоретическим выводам *синглетами*, а ортотермы — *триплетами*. Мы вернёмся к этому вопросу в § 5.

¹⁾ Принадлежащий некоторому (возможно, и комплексному) «распределению плотности» ρ «кулоновский потенциал» φ удовлетворяет уравнениям

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \quad \Delta\varphi^* = -4\pi\rho^* \quad (a)$$

и представляется, если 2 означает точку наблюдения, а 1 — точку интегрирования, интегралом

$$\varphi(2) = \int \frac{\rho(1)}{r_{12}} d\tau_1. \quad (б)$$

В силу теоремы Грина, если φ исчезает на бесконечности, то

$$\int (\text{grad } \psi(2), \text{ grad } \varphi^*(2)) d\tau_2 = - \int \varphi(2) \Delta\varphi^*(2) d\tau_2 \quad (в)$$

Левая часть последнего равенства положительна; правая будет, в силу (а) и (б), равна

$$4\pi \int \int \frac{\rho(1)\rho^*(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \quad (г)$$

Следовательно, как показывает сравнение (г) и (21), ε_{12} также будет положительным. Здесь следует ещё отметить, что обозначенная здесь через ρ «плотность» не имеет ничего общего с плотностью облаков заряда электронов 1 или 2, о которой будет идти речь в (23).

Опуская множитель e^2 , мы назовём e_{12} *обменным интегралом* и обозначим его через A :

$$A = \int \frac{d\tau}{r_{12}} \psi_1^*(1) \psi_n(1) \psi_1(2) \psi_n^*(2). \quad (22)$$

Соответственно e_{11} мы назовём *кулоновским взаимодействием* C :

$$C = \int \frac{d\tau}{r_{12}} \psi_1^*(1) \psi_1(1) \psi_n^*(2) \psi_n(2). \quad (23)$$

Действительно, C означает просто классически вычисленную взаимную потенциальную энергию облака заряда электрона 1 с плотностью $\rho_1 = \psi_1^* \psi_1$ и электрона 2 с плотностью $\rho_2 = \psi_n^* \psi_n$. Напротив, A из-за входящих в неё смешанных плотностей $\psi^*(1) \psi_n(1)$ и т. п. является величиной, характерной для волновой механики, которую нельзя прямо истолковать классически.

Вычислим A для простейшего случая, именно для $n=2$. Тем самым мы определим [ср. (20)] разность энергий между $2P$ -термом (парасистема) и $2p$ -термом (ортосистема). Из $n=2$ и $l=1$ следует $m = \pm 1$ или 0. Ради простоты мы проведём вычисления для $m=0$. В состоянии $n=1$, естественно, $l=m=0$. Нам надо воспользоваться водородными функциями

$$\psi_1 = R_1, \quad \psi_n = \psi_2 = R_2 \cos \vartheta. \quad (24)$$

Мы написали здесь $\cos \vartheta$ вместо $\cos \vartheta_1$ или $\cos \vartheta_2$ и R_2 вместо $R_1(r_2)$ и $R_1(r_2)$ и т. д., судя по тому, о каком из электронов, 1 или 2, идёт речь.

Нам потребуется прежде всего разложение $\frac{1}{r_{12}}$ по шаровым функциям, содержащееся в (1) и (2) дополнения (6):

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|r|} \sum \alpha^l P_l(\cos \Theta),$$

где $|r|$ — *большее* из обоих расстояний r_1 и r_2 , а α — отношение меньшего из них к большему. Мы будем считать, что $P_l(\cos \Theta)$ выражено с помощью теоремы сложения (II.10.17) как функция ϑ_1 , ϑ_2 и $\varphi_1 - \varphi_2$. Тогда при интегрировании по $d\tau = r_1^2 dr_1 \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 d\varphi_1 - r_2^2 dr_2 \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 d\varphi_2$ все члены с $\cos m(\varphi_1 - \varphi_2)$ выпадут, и мы получим:

$$\int \frac{d\tau}{r_{12}} \psi_1(2) \psi_n^*(2) = 2\pi \int_0^\infty \frac{r_2^2}{|r|} R_1(r_2) R_2(r_2) dr_2 \sum \alpha^l P_l(\cos \vartheta_1) \int_0^\pi P_l(\cos \vartheta_2) P_1(\cos \vartheta_2) \sin \vartheta_2 d\vartheta_2. \quad (25)$$

В последнем интеграле в виде $P_1(\cos \vartheta_2)$ записан появляющийся в (24) множитель $\cos \vartheta$. Но тем самым мы подчеркнули, что этот интеграл только для $l=1$ отличен от нуля, а именно равен $\frac{2}{3}$. Тогда правая часть (25) станет равной, если учесть смысл $|r|$ и α :

$$\frac{4\pi}{3} P_1(\cos \vartheta_1) \left\{ \frac{1}{r_1^2} \int_0^{r_1} r_2^2 R_1(r_2) R_2(r_2) dr_2 + r_1 \int_{r_1}^\infty R_1(r_2) R_2(r_2) dr_2 \right\}.$$

Согласно (22) и (24) это выражение надо помножить на

$$d\tau_1 R_1(r_1) R_2(r_1) P_1(\cos \vartheta_1)$$

и проинтегрировать после этого по r_1 и по углам θ_1 и φ_1 . При интегрировании по углам возникнет ещё один множитель $\frac{4\pi}{3}$, и мы получим окончательно:

$$A = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \left[\int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 f(r_1, r_2) + \int_0^\infty dr_1 \int_{r_1}^\infty dr_2 f(r_2, r_1) \right], \quad (26)$$

где положено для краткости

$$f(r_1, r_2) = r_2^3 R_1(r_1) R_2(r_1) R_1(r_2) R_2(r_2).$$

Но двойные интегралы в (26) равны друг другу. Именно с помощью известного приёма Дирихле можно показать, что

$$\int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 f(r_1, r_2) = \int_0^\infty dr_2 \int_{r_2}^\infty dr_1 f(r_1, r_2) = \int_0^\infty dr_1 \int_{r_1}^\infty dr_2 f(r_2, r_1). \quad (26a)$$

Первая часть этого двойного равенства отвечает переходу от разбиения области интегрирования на вертикальные строчки к разбиению на горизонтальные строчки, а вторая — простому переименованию переменных интегрирования. Поэтому мы получаем вместо (26):

$$A = 2 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \int_0^\infty r_1^3 dr_1 R_1(1) R_2(1) \int_{r_1}^\infty dr_2 R_1(2) R_2(2). \quad (27)$$

Обратимся теперь к таблице на стр. 80 и уравнению (2) на стр. 79:

$$R_1(r) = N_1 e^{-s}, \quad R_2(r) = N_2 s e^{-\frac{s}{2}}, \quad s = \frac{Z}{a} r \quad (28)$$

и получим тогда для интеграла по r_2 в (27):

$$\begin{aligned} \frac{a}{Z} N_1 N_2 \int_{s_1}^\infty s ds e^{-\frac{s}{2}} &= \frac{a}{Z} \left(\frac{2}{3}\right)^2 N_1 N_2 \int_{x_1}^\infty x dx e^{-x}, \\ x = \frac{2}{3} s, \quad x_1 = \frac{2}{3} s_1 = \frac{2}{3} \frac{Z}{a} r_1. \end{aligned}$$

Затем учтём, что

$$\int_{x_1}^\infty x dx e^{-x} = -\frac{d}{d\alpha} \int_{x_1}^\infty dx e^{-\alpha x} = -\frac{d}{d\alpha} \frac{e^{-\alpha x_1}}{\alpha}$$

с условием, что в конце α полагается равным единице.

Если подставить это в (27) и использовать в качестве переменной интегрирования x_1 вместо r_1 , то получится:

$$A = -2 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \left(\frac{a}{Z}\right)^5 \left(\frac{2}{3}\right)^7 N_1^2 N_2^2 \frac{d}{d\alpha} \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty x_1^4 e^{-(1+\alpha)x_1} dx_1.$$

Оставшийся здесь ещё интеграл равен $\frac{4!}{(1+\alpha)^5}$. Поэтому

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{\alpha} \int \dots dx_1 = 4! \frac{d}{d\alpha} \left\{ \frac{1}{\alpha} \frac{1}{(1+\alpha)^5} \right\} = -4! \left(\frac{1}{2^5} + \frac{5}{2^6} \right) = -\frac{3 \cdot 7}{8},$$

откуда

$$A = \frac{7}{3} \left(\frac{2}{3}\right)^5 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \left(\frac{a}{Z}\right)^5 N_1^2 N_2^2. \quad (29)$$

Но значения нормировочных множителей дают:

$$N_1^2 N_2^2 = \frac{1}{32\pi^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^6, \quad (30)$$

так что

$$A = \frac{2^4 \cdot 7}{3^8} \frac{Z}{a}. \quad (31)$$

Согласно (20) для искомой разности термов (с обозначениями: R — постоянная Ридберга, $hR = \frac{e^2}{2a}$ — энергия атома водорода и $Z = 2$) отсюда получается:

$$\frac{\Delta W}{Rh} = \frac{2^7 \cdot 7}{3^8} = 0,136. \quad (32)$$

Наблюдаемое на опыте значение значительно меньше, именно:

$$\frac{\Delta W}{Rh} = 0,019. \quad (33)$$

Гейзенберг достиг лучшего согласия с опытом, учитывая экранирование внешнего электрона внутренним уже в нулевом приближении и заменяя в соответствии с этим в R_2 в (28) Z на $Z - 1$, т. е.

$$s \text{ на } s' = \frac{Z-1}{a} r,$$

подтверждение чему можно получить и из теории возмущений. Тогда вместо (29), (30) и (31) получается:

$$A = 3 \cdot 7 \cdot 2^5 \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{(Z-1)^2 a^5}{(3Z-1)^7} N_1^2 N_2^2,$$

$$N_1^2 N_2^2 = \frac{1}{32\pi^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^3 \left(\frac{Z-1}{a}\right)^3, \quad A = \frac{7}{3} 2^4 \frac{(Z-1)^5 Z^3}{(3Z-1)^7} \frac{1}{a}.$$

Поэтому вместо (32) для $Z = 2$ получается:

$$\frac{\Delta W}{Rh} = \frac{7 \cdot 2^9}{3 \cdot 5^7} = 0,016, \quad (34)$$

что уже близко к опытному значению.

Мы определили здесь относительные положения орто- и паратермов с помощью обменного интеграла A . Мы могли бы также попробовать вычислить в первом приближении и абсолютное положение, например среднего значения обоих термов с помощью кулоновского взаимодействия C , пользуясь следующей из (16а) формулой:

$$\frac{1}{2} (W_{\text{орто}} + W_{\text{пара}}) = W_0 + \varepsilon_{11} = W_0 + e^2 C.$$

Однако результат оказался бы очень неточным, даже если ввести последнюю поправку. Здесь могло бы помочь только проведение утомительных вычислений возмущений второго порядка. Напротив, в гл. X мы познакомимся с удивительно точным численным методом определения абсолютных положений уровней, в особенности основного терма (Хиллераас).

В заключение подчеркнём, что выполненное Гейзенбергом вычисление по теории возмущений хотя и не привело к полному истолкованию спектра гелия, но имело всё же громадную ценность для разъяснения общих спектральных закономерностей в двухэлектронных системах. Кроме того, оно приводит благодаря открытию обменного вырождения к методически весьма существенной новой точке зрения.

§ 3. МОЛЕКУЛА ВОДОРОДА И ГОМЕОПОЛЯРНАЯ СВЯЗЬ

Молекула водорода, так же как и атом гелия, ставит нас опять перед двухэлектронной задачей. Обозначим оба электрона 1 и 2, а оба ядра a и b . Ядра мы будем считать закреплёнными на произвольном в дальнейшем расстоянии $d = r_{ab}$. Тем самым наша задача опять оказывается шестимерной, а волновое уравнение, записанное аналогично (2.1), гласит:

$$L\psi = 0, \quad \begin{cases} L = \Delta + \frac{2m}{\hbar^2}(W - V), \\ \Delta = \Delta_1 + \Delta_2. \end{cases} \quad (1)$$

Потенциальная энергия V складывается из шести членов:

$$V = \frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (2)$$

Если мы считали бы здесь, как и в проблеме гелия, возмущением лишь член $\frac{e^2}{r_{12}}$ (постоянный член $\frac{e^2}{r_{ab}}$ можно объединить с W), то в силу (2) оба электрона находились бы под влиянием *обоих* ядер a и b . Мы могли бы тогда расщепить (1) в нулевом приближении на уравнения для иона молекулы H_2 для каждого из двух электронов, но не смогли бы решить его просто с помощью водородных собственных функций. Мы поступим поэтому, следуя Гайтлеру и Лондону, более радикально и будем проводить вычисления в нулевом приближении так, как будто электрон 1 находился бы под влиянием только ядра a , а электрон 2 — только ядра b , или же, наоборот, мы отнесем 1 к b , а 2 к a . Таким образом, в нулевом приближении мы будем иметь функции:

$$u = \psi_a(1)\psi_b(2) \quad \text{и} \quad v = \psi_b(1)\psi_a(2), \quad (3)$$

где ψ — собственные функции водорода, которые мы будем предполагать нормированными на 1. Функции u и v удовлетворяют дифференциальным уравнениям нулевого приближения:

$$\left. \begin{aligned} \Delta u + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W_0 + \frac{e^2}{r_{a1}} + \frac{e^2}{r_{b2}} \right) u &= 0, \\ \Delta v + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W_0 + \frac{e^2}{r_{a2}} + \frac{e^2}{r_{b1}} \right) v &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Оба уравнения тождественны с точностью до произвольной нумерации электронов и относятся к одной энергии W_0 , которая складывается из энергий $W_0(1)$ и $W_0(2)$. Итак, как и в атоме гелия, мы пришли к «обменному вырождению».

Физический смысл нашего приближения (3) состоит в том, что мы принимаем в нулевом приближении оба ядра a и b удалёнными очень далеко друг от друга. Если тогда электрон 1 расположен вблизи a , а электрон 2 — вблизи b , то u даст достаточно точное описание такого состояния. Сохра-

нённые в первом из уравнений (4) члены потенциальной энергии отличаются от полного выражения (2) на

$$\frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (4a)$$

Все члены этого выражения являются, согласно нашему допущению, малыми. Если, наоборот, электрон 1 расположен вблизи b , а электрон 2 вблизи a , то состояние будет приближённо описываться функцией v и все опущенные во втором из уравнений (4) члены

$$\frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (46)$$

опять являются малыми величинами.

Правда, впоследствии мы не будем ограничиваться большими r_{ab} , но будем сразу интересоваться расстояниями, сравнимыми с размерами атома. Поэтому наш приём является весьма грубым и мы не можем ожидать большой точности.

Чтобы найти решение (4), образуем, как в (2.7),

$$w = \alpha u + \beta v.$$

В этом семействе содержатся, в частности, и симметричная и антисимметричная комбинации:

$$w_+ = N_+(u + v), \quad w_- = N_-(u - v), \quad (5)$$

которые можно сравнить с несколько более специализированными комбинациями (2.17) и которые образуют, как и (2.17), нужные начальные функции для дальнейшего применения теории возмущений. Если мы потребуем и здесь нормировки на 1, именно:

$$1 = \int w_{\pm}^2 d\tau, \quad d\tau = d\tau_1 d\tau_2,$$

и положим сокращённо

$$S = \int uv d\tau, \quad (6)$$

то получим немедленно

$$1 = N_{\pm}^2 (2 \pm 2S),$$

и, следовательно,

$$N_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2 \pm 2S}}. \quad (7)$$

Чтобы перейти к вычислению возмущений, положим

$$\Psi = w_{\pm} + \varphi_{\pm}, \quad W = W_0 + \varepsilon_{\pm} \quad (8)$$

и потребуем $L\Psi = 0$, или, что то же самое,

$$L\varphi_{\pm} = -Lw_{\pm}. \quad (9)$$

Используя в правой части уравнения (4), благодаря которым Δu и Δv сократятся с соответствующими членами из $W - V$, мы сможем написать в результате простого преобразования уравнения (1):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{2 \pm 2S} L\varphi_{\pm} = \left(-\varepsilon_{\pm} + \frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) u \pm \left(-\varepsilon_{\pm} + \frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) v. \quad (9a)$$

Правая часть этого неоднородного уравнения содержит e_{\pm} в качестве единственной неизвестной. Мы могли бы получить её непосредственно из нашей теоремы об ортогональности (стр. 294), если бы u и v точно удовлетворяли уравнениям $L \begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix} = 0$. Несмотря на то, что это обстоятельство не имеет места [ведь в действительности u и v удовлетворяют изменённым уравнениям (4)], использование требования ортогональности, как мы покажем, привело бы и здесь в основном к цели.

Итак, помножим (9а) сначала на u и проинтегрируем по $d\tau$. Получим:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{2 \pm 2S} \int u L \varphi_{\pm} d\tau = -e_{\pm} (1 \pm S) + e^2 (C \pm A), \quad (10)$$

где введены обозначения:

$$C = \int \left(\frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} \right) u^2 d\tau, \quad (11)$$

$$A = \int \left(\frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} \right) uv d\tau. \quad (12)$$

Покажем, что интеграл в левой части (10) является малой второго порядка. Для этого воспользуемся теоремой Грина:

$$\int u L \varphi_{\pm} d\tau = \int \varphi_{\pm} L u d\tau = -\frac{2m}{\hbar^2} \int \varphi_{\pm} \left(\frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) u d\tau.$$

Здесь использовано первое из уравнений (4) и опущен член второго порядка $\varphi_{\pm} e_{\pm}$. Но круглая скобка в этом интеграле совпадает с (4а), следовательно, является малой первого порядка, поэтому из-за умножения на φ_{\pm} всё подынтегральное выражение будет малой второго порядка. Мы можем, следовательно, заменить в нашем приближении левую часть (10) нулём. Тогда (10) приводит к уравнению для поправки к энергии в первом приближении:

$$e_{\pm} (1 \pm S) = e^2 (C \pm A). \quad (13)$$

Если мы помножим (9) на v и проинтегрируем, то получим вместо правой части (10):

$$-e_{\pm} (S \pm 1) \pm e^2 (C' \pm A'), \quad (14)$$

где теперь C' означает, например,

$$C' = \int \left(\frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} \right) v^2 d\tau. \quad (14a)$$

Но это выражение отличается от C лишь нумерацией точек интегрирования 1 и 2, что не может оказать влияния на значение интеграла. Поэтому должно быть $C' = C$; аналогично заключаем, что и $A' = A$. То, что левая часть получающегося таким образом уравнения будет опять малой второго порядка, доказывается так же, как и ранее. Итак, выражение (14) нужно приравнять нулю, причём получаются те же значения для e_{\pm} , что и из (13). Тем самым мы показали, что умножение на v не приносит по сравнению с умножением на u ничего нового. Мы можем рассматривать это как критерий того, что наши комбинации φ_{\pm} в (5) действительно являются правильными начальными функциями для вычислений по теории возмущений, поскольку они приводят к непротиворечивым значениям e_{\pm} в ходе вычисления возмущений.

Как и в предыдущем параграфе, мы назовём C кулоновским взаимодействием, а A — обменным интегралом. Чтобы обосновать эти обозначения, перепишем выражение (11) для C ещё раз, учитывая, что u и v нор-

мированы, так же как и ψ , на 1. Вводя плотности¹⁾:

$$\rho_1 = \psi_a^2(1) \quad \text{и} \quad \rho_2 = \psi_b^2(2),$$

мы получим из (11):

$$C = \frac{1}{r_{ab}} - \int \frac{\rho_2 d\tau_2}{r_{a2}} - \int \frac{\rho_1 d\tau_1}{r_{b1}} + \int \frac{\rho_1 \rho_2 d\tau_1 d\tau_2}{r_{12}}. \quad (15)$$

Последовательные члены означают здесь: энергию отталкивания ядер a и b ; энергию притяжения облака заряда 2 ядром a ; энергию притяжения облака заряда 1 ядром b ; энергию взаимного отталкивания облаков заряда 1 и 2, все сосчитанные для единичных зарядов ядер и электронов. Все эти энергии имеют кулоновский характер. Энергии притяжения 1 к a и 2 к b , уже учтённые в невозмущённом состоянии u , не появляются, естественно, в энергии возмущения C . Напротив, в выражении (12) для A вместо собственно плотностей ρ_1 и ρ_2 выступают смешанные, следовательно не кулоновские, плотности ρ_{12} .

Вычислением интегралов C и A для основного состояния молекулы H_2 мы займёмся в § 4. Приведём здесь заимствованные отсюда основные результаты: $A < 0$, $C > 0$ или < 0 , судя по значению r_{ab} . Отсюда следует, что $C - A > 0$; напротив, $C + A < 0$, исключая малые r_{ab} . Так как в интересующей нас области r_{ab} выполняется ещё и $S < 1$, то согласно (13) будет

$$\varepsilon_- > \varepsilon_+, \quad (16)$$

где ε_+ относится к симметричному, а ε_- — к антисимметричному состоянию. Соответствующие энергии будут равны

$$W_{\text{симм}} = W_0 + \varepsilon_+, \quad W_{\text{антисимм}} = W_0 + \varepsilon_-,$$

поэтому согласно (16)

$$W_{\text{антисимм}} > W_{\text{симм}}. \quad (17)$$

Уровень энергии для симметричного в координатах обоих электронов состояния лежит ниже, чем для антисимметричного состояния. Такое положение вещей обратно имевшему место для He, что зависит от противоположного знака у A . Это становится ясным из следующего сопоставления:

Атом He	Молекула H_2 ²⁾
$A > 0$	$A < 0$
$W_{\text{симм}} > W_{\text{антисимм}}$ [уравнение (2.20)]	$W_{\text{симм}} < W_{\text{антисимм}}$ [уравнение (17)]
Основной терм симметричен (парасистема)	Основной терм симметричен
Соответствующий терм в антисимметричной (орто) системе не существует вовсе	Соответствующий терм в антисимметричной системе существует, но лежит выше

¹⁾ Так как мы будем в дальнейшем интересоваться только основным состоянием молекулы H_2 , в котором ψ действительно, то нам будет достаточно определения $\rho = \psi^2$. Для возбуждённых состояний мы должны были бы ещё выше, начиная со стр. 535, перейти в некоторых местах к комплексно-сопряжённым выражениям.

²⁾ Мы избегаем использование обозначений «орто» и «пара» для молекулы H_2 , поскольку они получают здесь иное значение (ср. § 6).

Для обоснования последнего утверждения служит следующее замечание. Основное состояние атома гелия (ср. стр. 527) невырождено, для него $u = v$, и антисимметричная собственная функция $u - v$ исчезает. Напротив, для молекулы H_2 в основном состоянии $u - v$ не исчезает, несмотря на совпадение входящих в u и v функций $\psi(1)$ и $\psi(2)$, так как согласно (3) они относятся к расположенным в разных точках ядрам a и b . В самом деле, если мы воспользуемся представлением (4.7) (где α — обратное значение радиуса водорода), то получим:

$$u - v = N^2 (e^{-\alpha(r_{a1} + r_{b2})} - e^{-\alpha(r_{a2} + r_{b1})}) \neq 0, \tag{18}$$

так как, вообще говоря,

$$r_{a1} + r_{b2} \neq r_{a2} + r_{b1}. \tag{18a}$$

Мы дополним наше сопоставление структуры термов, обратившись к результатам § 5. Как для атома гелия, так и для молекулы H_2 симметричные термы являются синглетами, а антисимметричные — триплетами. Основному состоянию в обоих случаях отвечает синглетный терм.

Изложенное иллюстрируется рис. 47, детали которого будут обоснованы выкладками следующего параграфа. На этом рисунке в горизонтальном направлении отложено расстояние между ядрами r_{ab} в долях радиуса атома водорода, т. е.

$$r = \alpha r_{ab}, \quad \alpha = \frac{1}{\text{радиус атома водорода}}. \tag{19}$$

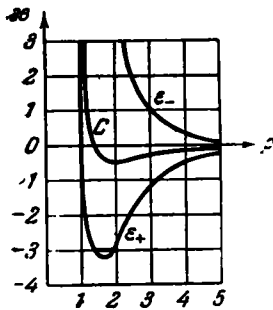


Рис. 47. Энергия молекулы H_2 (нижняя кривая) как функция измеренного в атомных единицах расстояния между ядрами r . Кривая C изображает кулоновское взаимодействие. Верхняя кривая представляет собой энергию для антисимметричной собственной функции.

Вертикальное направление использовано для представления кулоновского взаимодействия C в основном состоянии и соответствующей поправки к энергии ϵ_{\pm} . Для построения последней к кривой C добавляется $\mp A$ и результат делится на $1 \mp S$. Таким образом, для ϵ_+ получается вогнутая яма, а для ϵ_- — кривая, монотонно убывающая с ростом r . Небольшая яма замечается уже на кривой для C , на кривой для ϵ_+ она существенно углубляется. Существование минимума на этой кривой является решением старой загадки химической гомеополарной связи. Это решение даётся, как мы видим, обменным вырождением. Когда невозмущённая энергия W_0

расщепляется на два возмущённых энергетических уровня $W_0 + \epsilon_{\pm}$, то возникают две кривые энергии, одна из которых делает возможным состояние стабильного равновесия обоих ядер. Равновесное расстояние $r_{мин}$ изображается на рисунке абсциссой точки минимума кривой для ϵ_+ . Численное значение для этого расстояния, к которому приводит вычисление в (4.35), составляет:

$$r_{мин} = 1,58, \quad r_{ab} = 0,79 \text{ \AA}, \tag{20}$$

в то время как наблюдение многих линий спектра H_2 даёт возможность заключить, что $r_{ab} = 0,75 \text{ \AA}$.

Худшее согласие получается для соответствующего значения энергии $\epsilon_{мин}$ освобождающейся при соединении двух атомов H в молекулу H_2 :

$$\epsilon_{мин} = W - W_0 = -0,24 \text{ hR} = -3,2 \text{ эв}. \tag{21}$$

Экспериментальное значение, определяемое, если отвлечься от внака, энергией диссоциации молекулы H_2 [ср. т. 1, гл. VII, § 3, (4)] оказывается заметно меньшим¹⁾, именно равным $-4,4$ эв.

Мы не представляем себе дело таким образом, что в основном состоянии оба ядра a и b отстоят друга от друга как раз на расстояние r_{ab} . Действительно, молекула H_2 является простейшей реализацией гармонического осциллятора, который при значении колебательного квантового числа $v = 0$ отнюдь не находится в покое, что противоречило бы соотношению неопределённостей, но обладает нулевой энергией $\frac{h\nu}{2}$. Следовательно, расстояние r_{ab} между ядрами будет периодически увеличиваться и уменьшаться. Мы изобразили это схематически на рисунке горизонтальной стрелкой на дне ямы. Тут надо ещё заметить, что расхождение между нашим $\epsilon_{\text{ядра}}$ и взятой со знаком минус энергией диссоциации ещё увеличивается за счёт существования нулевой энергии.

Вместо того чтобы говорить об обменной энергии, мы могли бы говорить и об обменной силе, которой на нашем рисунке соответствует наклон энергетической кривой. Она проявляется справа или слева от середины ямы как притяжение или отталкивание обоих ядер и приводит к маятникообразным колебаниям вокруг положения равновесия. Напротив, ясно, что поведение кривой ϵ_{-} для всех расстояний r_{ab} означает отталкивание; если два атома водорода находятся в антисимметричном состоянии и приближаются друг к другу, то они не связываются в молекулу, но упруго рассеиваются друг на друге.

Обменные силы ответственны и за взаимное сцепление элементарных частиц (протонов и нейтронов) внутри ядра, как то известно сейчас благодаря исследованиям школы Гейзенберга.

§ 4. АНАЛИТИЧЕСКИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ ДОПОЛНЕНИЯ

Всякую задачу с двумя центрами естественно рассматривать в эллиптических координатах. Мы определим их сначала только для полуплоскости $x, y > 0$ соотношениями:

$$x = E \operatorname{ch} u \cos \vartheta,$$

$$y = E \operatorname{sh} u \sin \vartheta,$$

где ch и sh — гиперболические функции, связанные друг с другом формулой $\operatorname{ch}^2 u - \operatorname{sh}^2 u = 1$. Если мы исключим отсюда ϑ или соответственно u , то получим:

$$\frac{x^2}{A^2} + \frac{y^2}{B^2} = 1, \quad \begin{cases} A = E \operatorname{ch} u, \\ B = E \operatorname{sh} u \end{cases}$$

и

$$\frac{x^2}{A'^2} - \frac{y^2}{B'^2} = 1, \quad \begin{cases} A' = E \cos \vartheta, \\ B' = E \sin \vartheta. \end{cases}$$

Следовательно, A, B и A', B' означают главные оси системы конфокальных эллипсов или гипербол, а E — их общий эксцентриситет. Расстояние между двумя неподвижными центрами a и b составляет

$$r_{ab} = 2E; \quad (1)$$

¹⁾ Ср. примыкающую сюда дискуссию у O. W. Richardson, Proc. Roy. Soc. 152, 503 (1935).

расстояние от этих центров до некоторой третьей точки p можно назвать r_a и r_b . Мы найдём их, если будем исходить из уравнений, определяющих эллипсы и гиперболы как геометрические места:

$$\left. \begin{aligned} r_a + r_b &= 2A = 2E \operatorname{ch} u, \\ r_a - r_b &= 2A' = 2E \cos v, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

получив:

$$r_a = E (\operatorname{ch} u + \cos v), \quad r_b = E (\operatorname{ch} u - \cos v). \quad (3)$$

Для эллипсов имеет место неравенство

$$0 \leq u \leq \infty,$$

а для гипербол в полуплоскости $y > 0$:

$$0 \leq v \leq \pi.$$

Отрезок, соединяющий фокусы, задаётся уравнением $u = 0$, а его продолжение в сторону положительных или отрицательных x задаётся уравнением $v = 0$ или $v = \pi$ (ср. рис. 48).

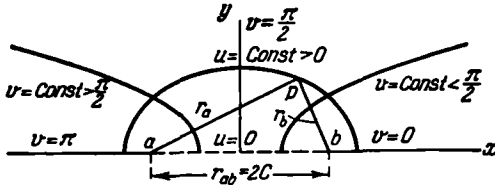


Рис. 48. Схема построения эллиптических координат. Кривые $u = \text{const}$ являются эллипсами, $v = \text{const}$ — гиперболами. Для полуплоскости $y > 0$ переменные u и v меняются в пределах $0 < u < \infty$, $0 < v < \pi$. Третья координата w отвечает вращению этой полуплоскости вокруг оси x .

Чтобы перейти к координатам в пространстве, повернём нашу полуплоскость на угол w относительно оси x и положим:

$$\left. \begin{aligned} x &= E \operatorname{ch} u \cos v, \\ y &= E \operatorname{sh} u \sin v \cos w, \\ z &= E \operatorname{sh} u \sin v \sin w. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Вычислим следующий функциональный детерминант:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \\ \frac{\partial x}{\partial w} & \frac{\partial y}{\partial w} & \frac{\partial z}{\partial w} \end{vmatrix}.$$

Так как $\frac{\partial x}{\partial w} = 0$, то его можно разложить по элементам последней строки и привести к виду:

$$\Delta = E^3 \operatorname{sh} u \sin v (\operatorname{ch}^3 u - \cos^3 v). \quad (5)$$

Тем самым мы должны писать для элемента интегрирования $d\tau_1$ точки 1:

$$d\tau_1 = E^3 \operatorname{sh} u_1 \sin v_1 (\operatorname{ch}^3 u_1 - \cos^3 v_1) du_1 dv_1 dw_1 \quad (5a)$$

и соответственно для $d\tau_2$.

1. Вычислим с помощью полученных формул сначала [ср. (3.6)]:

$$S = \int uv d\tau = \int \int uv d\tau_1 d\tau_2.$$

Согласно (3.3) S складывается из двух равных друг другу множителей, так что мы можем написать:

$$V\bar{S} = \int \psi_a(1) \psi_b(1) d\tau_1. \quad (6)$$

В основном состоянии

$$\psi_a = Ne^{-ar}a, \quad \psi_b = Ne^{-ar}b, \quad \begin{cases} N^2 = \frac{a^3}{\pi}, \\ \alpha = \frac{1}{a}. \end{cases} \quad (7)$$

Но в силу (2) отсюда получается:

$$\psi_a \psi_b = N^2 e^{-\rho \text{ch } u}, \quad \rho = 2\alpha E = \frac{rab}{a}, \quad (8)$$

где ρ является измеренным в атомных единицах расстоянием между ядрами. Тогда можно записать (6), выполняя сразу интегрирование по ω (индекс 1 можно для дальнейшего опустить) и учитывая значение N и ρ , в виде:

$$\sqrt{S} = \frac{\rho^3}{3} \int_0^\infty \text{sh } u \, du e^{-\rho \text{ch } u} \int_0^\pi \sin v \, dv (\text{ch}^2 u - \cos^2 v)$$

или с помощью переменных интегрирования

$$\xi = \text{ch } u, \quad \eta = \cos v \quad (9)$$

в виде:

$$\sqrt{S} = \frac{\rho^3}{3} \int_1^\infty d\xi e^{-\rho\xi} \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) = \frac{\rho^3}{3} \int_1^\infty d\xi e^{-\rho\xi} \left(\xi^2 - \frac{1}{3} \right).$$

Учитывая, что

$$\int_1^\infty e^{-\rho\xi} d\xi = \frac{e^{-\rho}}{\rho}, \quad \int_0^\infty \xi^2 e^{-\rho\xi} d\xi = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \frac{e^{-\rho}}{\rho} = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{2}{\rho} + \frac{2}{\rho^2} \right), \quad (10)$$

получим:

$$\sqrt{S} = \frac{\rho^3}{2} \frac{e^{-\rho}}{\rho} \left(1 + \frac{2}{\rho} + \frac{2}{\rho^2} - \frac{1}{3} \right) = e^{-\rho} \left(1 + \rho + \frac{\rho^2}{3} \right)$$

и

$$S = \left(1 + \rho + \frac{\rho^2}{3} \right)^2 e^{-2\rho}. \quad (11)$$

2. Перейдём теперь к интегралам, появляющимся в кулоновском взаимодействии C (3.15).

Оба первых интеграла тут равны друг другу, так как один переходит в другой при одновременной замене a на b и 1 на 2. Поэтому мы рассмотрим, например, первый интеграл (знаменатель r_{a2} характерным образом сокращается с элементом объёма $d\tau_2$):

$$\int \frac{\psi_{b2}^2}{r_{a2}} d\tau_2 = \frac{\alpha^3 E^2}{\pi} \int \text{sh } u \, du \int \sin v \, dv \int d\omega (\text{ch } u - \cos v) e^{-2\alpha E (\text{ch } u - \cos v)}. \quad (12)$$

Чтобы упростить интегрирование по u и v (интегрирование по ω даёт 2π), мы введём с помощью (9) и (8) ξ , η и ρ . Тогда правая часть запишется как

$$-\frac{\alpha \rho^2}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \int_1^\infty d\xi e^{-\rho\xi} \int_{-1}^{+1} d\eta e^{+\rho\eta} = -\frac{\alpha \rho^2}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ \frac{e^{-\rho}}{\rho} \frac{e^\rho - e^{-\rho}}{\rho} \right\} = -\frac{\alpha \rho^2}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{1 - e^{-2\rho}}{\rho^2}.$$

Отсюда мы находим для обоих искомым интегралов:

$$\int \frac{\rho_2}{r_{a2}} d\tau_2 = \int \frac{\rho_1}{r_{b1}} d\tau_1 = \frac{\alpha}{\rho} [1 - (1 + \rho) e^{-2\rho}]. \quad (13)$$

3. Оставляя временно последний интеграл в (3.15), обратимся теперь к представлению (3.12) для обменного интеграла A . Первый интеграл здесь нам уже известен, именно:

$$\frac{1}{r_{ab}} \int uv d\tau = \frac{\alpha S}{\rho}. \quad (14)$$

Оба следующих снова совпадают друг с другом (замена a на b и 1 на 2):

$$\int \frac{uv}{r_{a1}} d\tau = \int \frac{uv}{r_{b2}} d\tau.$$

В первом из них интегрирование по $d\tau_2$ [ср. (6)] даёт:

$$\int \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_2 = \sqrt{S},$$

откуда получается:

$$\int \frac{uv}{r_{a1}} d\tau = \sqrt{S} \int \frac{\psi_a(1) \psi_b(1)}{r_{a1}} d\tau_1.$$

Знаменатель r_{a1} опять сокращается при переходе к эллиптическим координатам. Если мы используем (8) и выполним интегрирование по ϖ , то получим:

$$2\sqrt{S} \alpha^3 E^2 \int_0^\infty e^{-\rho \operatorname{ch} u} \operatorname{sh} u du \int_0^\pi (\operatorname{ch} u - \cos v) \sin v dv. \quad (15)$$

Второй интеграл здесь даёт просто $2\operatorname{ch} u$. Если мы введём ещё в первом интеграле $\xi = \operatorname{ch} u$, то сможем тогда написать вместо (15):

$$\alpha \sqrt{S} \rho^2 \int_1^\infty \xi e^{-\rho \xi} d\xi = -\alpha \sqrt{S} \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{e^{-\rho}}{\rho},$$

откуда окончательно

$$\int \frac{uv}{r_{a1}} d\tau = \int \frac{uv}{r_{b2}} d\tau = \alpha \sqrt{S} (1 + \rho) e^{-\rho}. \quad (16)$$

4. Остались ещё два интеграла, содержащих в знаменателе r_{12} . Тот из них, который входит в C , удаётся вычислить использованными до сих пор методами, в то время как входящий в A требует привлечения новых математических средств.

Первый из них имеет вид:

$$\int \frac{u^2}{r_{12}} d\tau = \int \psi_a^2(1) d\tau_1 \cdot J, \quad J = \int \frac{\psi_b^2(2) d\tau_2}{r_{12}}. \quad (17)$$

В J мы используем полярные координаты с началом в ядре b , именно постоянное и переменное расстояния:

$$r_1 = r_{b1}, \quad r_2 = r_{b2},$$

и углы Θ, Φ между r_1 и r_2 , или соответственно вокруг r_1 . Тогда будет:

$$d\tau_2 = r_2^2 dr_2 \sin \Theta d\Theta d\Phi$$

и уже известным образом [ср. (1) и (2) дополнения б]:

$$\frac{1}{r_{12}} = \begin{cases} \frac{1}{r_1} \sum \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n P_n(\cos \Theta), & r_2 < r_1, \\ \frac{1}{r_2} \sum \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n P_n(\cos \Theta), & r_2 > r_1. \end{cases}$$

Отсюда при учёте (7) следует:

$$J = 4\alpha^3 \left\{ \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} r_2^2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} r_2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 \right\},$$

так как при интегрировании по Θ все шаровые функции, исключая $P_0 = 1$, выпадают. Отсюда легко получается:

$$J = \frac{1}{r_1} [1 - (1 + \alpha r_1) e^{-2\alpha r_1}].$$

По определению r_1 , было бы правильнее писать вместо него r_{1b} . Подставляя полученный результат в (17) и разделяя возникающее выражение на два члена, находим:

$$\begin{aligned} \int \frac{u^2}{r_{12}} d\tau &= \int \frac{\psi_a^2(1) d\tau_1}{r_{b1}} - J_1; \\ J_1 &= \int \frac{\psi_a^2(1)}{r_{b1}} (1 + \alpha r_{b1}) e^{-2\alpha r_{b1}} d\tau_1. \end{aligned} \quad (18)$$

Первый интеграл в правой части (18) был вычислен в п. 2. Итак, нам осталось ещё заняться интегралом J_1 . Мы обратимся снова к эллиптическим координатам, учтём (2), (3) и (8) и получим в переменных ξ , η :

$$J_1 = \frac{\alpha \rho^2}{2} \int_1^{\infty} d\xi e^{-2\rho\xi} \int_{-1}^1 d\eta \left\{ 1 + \frac{\rho}{2} (\xi - \eta) \right\} (\xi + \eta).$$

Интегрирование по η даёт:

$$J_1 = \alpha \rho^2 \int_1^{\infty} d\xi e^{-2\rho\xi} \left\{ \xi + \frac{\rho}{2} \xi^2 - \frac{\rho}{6} \right\},$$

что можно записать также в виде:

$$J_1 = \alpha \rho^2 \left\{ -\frac{\rho}{6} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\rho}{8} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right\} \int_1^{\infty} d\xi e^{-2\rho\xi}.$$

Вычисление приводит к

$$J_1 = \alpha \left\{ \frac{3}{8} + \frac{3\rho}{4} + \frac{\rho^2}{6} \right\} e^{-2\rho}. \quad (19)$$

Б. Мы можем собрать теперь все члены, из которых состоит C . При этом первый член в правой части (18) сокращается с одним из обоих интегралов (13) и из (3.15), (12), (18) и (19) получается:

$$C = \frac{\alpha}{\rho} - \frac{\alpha}{\rho} \left[1 - (1 + \rho) e^{-2\rho} \right] - J_1 = \frac{\alpha}{\rho} \left(1 + \frac{5}{8} \rho - \frac{3}{4} \rho^2 - \frac{1}{6} \rho^3 \right) e^{-2\rho}. \quad (20)$$

Этот результат был получен Гайтлером и Лондоном. Как видно из него, для больших ρ C мало и отрицательно, а для малых ρ — велико и положительно. Нуль расположен в точке $\rho = 1,35$ (ср. среднюю кривую на рис. 47).

6. Нам остаётся ещё вычислить входящий в A интеграл со знаменателем r_{12} :

$$\int \frac{uv}{r_{12}} d\tau. \quad (21)$$

Здесь придётся с самого начала прибегнуть к эллиптическим координатам и выразить для этого через эти координаты $\frac{1}{r_{12}}$.

Мы используем то обстоятельство, что $\frac{1}{r_{12}}$, а потому и

$$\Phi = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{E}{r_{12}} dw_1 dw_2 \quad (21a)$$

удовлетворяют по координатам обеих точек 1 и 2 уравнению Лапласа

$$\Delta\Phi = 0.$$

Чтобы переписать это уравнение в наших эллиптических координатах, образуем сначала с помощью (4) элемент длины

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = E^2(\operatorname{ch}^2 u - \cos^2 v)(du^2 + dv^2) + E^2 \operatorname{sh}^2 u \sin^2 v d\varpi^2.$$

Используя обычные обозначения g_{ik} для коэффициентов элемента длины, мы имеем:

$$\left. \begin{aligned} g_{11} = g_{22} = E^2(\operatorname{ch}^2 u - \cos^2 v), \quad g_{33} = E^2 \operatorname{sh}^2 u \sin^2 v, \\ g_{ik} = 0 \quad \text{при } i \neq k. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Как известно, преобразование уравнения $\Delta\Phi = 0$ в произвольную ортогональную систему координат даёт:

$$\frac{\partial}{\partial u} \sqrt{\frac{g_{22}g_{33}}{g_{11}}} \frac{\partial\Phi}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial v} \sqrt{\frac{g_{33}g_{11}}{g_{22}}} \frac{\partial\Phi}{\partial v} + \frac{\partial}{\partial \varpi} \sqrt{\frac{g_{11}g_{22}}{g_{33}}} \frac{\partial\Phi}{\partial \varpi} = 0. \quad (22a)$$

Отсюда при учёте (22) получается в равной мере для обеих координатных пар u_1, v_1 и u_2, v_2 :

$$\frac{\partial}{\partial u} \left(\operatorname{sh} u \sin v \frac{\partial\Phi}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\operatorname{sh} u \sin v \frac{\partial\Phi}{\partial v} \right) = 0.$$

Это уравнение допускает разделение переменных, т. е. его можно переписать как

$$\Phi = \Phi_u \cdot \Phi_v, \quad (23)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\operatorname{sh} u} \frac{d}{du} \left(\operatorname{sh} u \frac{d\Phi_u}{du} \right) &= \lambda \Phi_u, \\ \frac{1}{\sin v} \frac{d}{dv} \left(\sin v \frac{d\Phi_v}{dv} \right) &= -\lambda \Phi_v, \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

где λ — параметр разделения. Его значение можно понять из теории шаровых функций. Действительно, второе из уравнений (24) совпадает с (I.3.16) для $m = 0$. Его решением, так как оно (ср. рис. 48) должно быть непре-

равным для $\cos v = \pm 1$, является зональная шаровая функция:

$$\Phi_v = P_n(\eta), \quad \eta = \cos v, \quad (24a)$$

и параметр разделения оказывается равным

$$\lambda = n(n+1), \quad \text{где } n \text{ — целое число.} \quad (24b)$$

Но и первое уравнение (24), переписанное с независимой переменной $\xi = \operatorname{ch} u$, имеет тот же вид, что и второе. Поэтому его общим решением будет:

$$\Phi_u = a_n P_n(\xi) + b_n Q_n(\xi), \quad \xi = \operatorname{ch} u, \quad (25)$$

где Q_n представляет собой определённую уравнением (16) дополнения (6) «шаровую функцию второго рода», которая сингулярна для $\xi = \pm 1$. Последнее обстоятельство обуславливает необходимость различать два случая: если $\xi_1 < \xi_2$, то соединяющая ядра линия, которой соответствует $u_1 = 0$, следовательно, значение $\xi_1 = 1$, доступна для электрона 1. Тогда необходимо выбрать, поскольку Φ_{u1} должна вести себя регулярно при $\xi_1 = 1$, $b_n = 0$. Если же, наоборот, $\xi_2 < \xi_1$, то то же самое выполняется для Φ_{u2} . В обоих случаях мы можем, кроме того, положить без ограничения общности $a_n = 1$. Отсюда получаются следующие выражения для решения первого из уравнений (24):

$$\Phi_{u1} = P_n(\xi_1), \quad \Phi_{u2} = a_n P_n(\xi_2) + b_n Q_n(\xi_2), \quad \xi_1 < \xi_2, \quad (25a)$$

$$\Phi_{u3} = P_n(\xi_2), \quad \Phi_{u1} = a_n P_n(\xi_1) + b_n Q_n(\xi_1), \quad \xi_2 < \xi_1. \quad (25b)$$

Представление искомой величины (21a) будет слагаться из суммы произведений вида (23) для каждой переменной, именно:

$$\left. \begin{aligned} \Phi &= \sum_n P_n(\eta_1) P_n(\eta_2) P_n(\xi_1) \{a_n P_n(\xi_2) + b_n Q_n(\xi_2)\}, & \xi_1 < \xi_2, \\ \Phi &= \sum_n P_n(\eta_1) P_n(\eta_2) P_n(\xi_2) \{a'_n P_n(\xi_1) + b'_n Q_n(\xi_1)\}, & \xi_2 < \xi_1. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Для того чтобы определить коэффициенты разложения a_n и b_n , предположим, что точка 1 совпала с фокусом b . Тогда при учёте (3) будет:

$$r_{12} = r_{b2} = E(\operatorname{ch} u_2 - \cos v_2) = E(\xi_2 - \eta_2)$$

и, согласно (21a),

$$\Phi = \frac{1}{\xi_2 - \eta_2}.$$

В этом предельном случае (ср. также рис. 48) $u_1 = v_1 = 0$, $\xi_1 = \eta_1 = 1$, $P_n(\xi_1) = P_n(\eta_1) = 1$, $\xi_2 > \xi_1$. Итак, согласно первой строке (26), будет:

$$\frac{1}{\xi_2 - \eta_2} = \sum_n P_n(\eta_2) \{a_n P_n(\xi_2) + b_n Q_n(\xi_2)\}.$$

Сравнение с уравнением (16) дополнения 6 приводит тогда к однозначному выводу:

$$a_n = 0, \quad b_n = n + \frac{1}{2}.$$

Совершенно аналогично получается:

$$a'_n = 0, \quad b'_n = n + \frac{1}{2}.$$

Тем самым мы получаем следующее наглядное представление для Φ :

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) P_n(\eta_1) P_n(\eta_2) \begin{cases} P_n(\xi_1) Q_n(\xi_2) & \text{при } \xi_1 < \xi_2, \\ P_n(\xi_2) Q_n(\xi_1) & \text{при } \xi_2 < \xi_1. \end{cases} \quad (27)$$

Ради полноты следует заметить, что, идя далее, можно получить для $\frac{E}{r_{12}}$ представление Фурье:

$$\frac{E}{r_{12}} = \sum_{m=0}^{\infty} \Phi_m \cos m\omega, \quad \omega = \omega_1 - \omega_2, \quad (27a)$$

нулевой член которого, как ясно из определения (21a), совпадает с нашим Φ .

7. Теперь мы можем перейти к вычислению (21). Временно, пока мы будем выполнять интегрирования по ω_1 и ω_2 , напомним вместо (21), учитывая (5a) и (8):

$$\text{const} \iiint \Phi e^{-\rho(\xi_1 + \xi_2)} (\xi_1^2 - \eta_1^2) (\xi_2^2 - \eta_2^2) d\xi_1 d\xi_2 d\eta_1 d\eta_2. \quad (28)$$

Интегрирование по η_1 и η_2 производится в пределах от -1 до $+1$, а по ξ_1 и ξ_2 разделяется согласно (27) на две части, судя по тому, $\xi_1 < \xi_2$ или $\xi_2 < \xi_1$. Так как, однако, подинтегральное выражение симметрично в ξ_1 и ξ_2 , то мы можем ограничить интегрирование полчетвертью $\xi_1 < \xi_2$ [верхняя строка в (27), ср. также (2.26a)], добавив к интегралу множитель 2.

Постоянная складывается из следующих множителей: $\frac{2\pi^2}{E}$ (после интегрирования по ω_1, ω_2 соответственно определению Φ), E^6 (из $d\tau_1, d\tau_2$), упомянутого выше множителя 2 и нормировочного множителя $\left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^2$, возникающего из (7). Итак:

$$\text{const} = 8E^5 \alpha^6 = \frac{\rho^5 \alpha}{4}. \quad (28a)$$

Будем выполнять сначала интегрирование по η_2 . Для последнего множителя под интегралом напомним:

$$\xi_2^2 - \eta_2^2 = \frac{2}{3} [P_2(\xi_2) - P_2(\eta_2)], \quad (28b)$$

что законно. Если мы умножим теперь его на Φ и проинтегрируем по η_2 , то от суммы при $P_2(\xi_2)$ останется только член с $n=0$, а при множителе $P_2(\eta_2)$ — только член с $n=2$, так как все остальные члены пропадут из-за ортогональности шаровых функций. Таким образом, из первой строки (27) получается:

$$\int_{-1}^{+1} \Phi (\xi_2^2 - \eta_2^2) d\eta_2 = \frac{2}{3} [P_2(\xi_2) Q_0(\xi_2) - P_2(\eta_1) P_2(\xi_1) Q_2(\xi_2)],$$

а отсюда путём умножения на $\xi_1^2 - \eta_1^2 = \frac{2}{3} [P_2(\xi_1) - P_2(\eta_1)]$ и интегрирования по η_1 :

$$\frac{4}{9} P_2(\xi_1) \left[2P_2(\xi_2) Q_0(\xi_2) + \frac{2}{5} Q_2(\xi_2) \right].$$

Таким образом, для всего выражения (28) [ср. также и (28a)] получается:

$$\frac{2\alpha\rho^5}{9} \int_1^{\infty} d\xi_2 \int_1^{\xi_2} d\xi_1 e^{-\rho(\xi_1+\xi_2)} P_2(\xi_1) \left\{ P_2(\xi_2) Q_0(\xi_2) + \frac{1}{5} Q_2(\xi_2) \right\}. \quad (29)$$

В этом выражении мы выполним сначала интегрирование по ξ_1 :

$$\int_1^{\xi_2} d\xi_1 e^{-\rho\xi_1} P_2(\xi_1) = \frac{1}{2} \int_1^{\xi_2} d\xi_1 e^{-\rho\xi_1} (3\xi_1^2 - 1) = \frac{1}{2} \left(3 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - 1 \right) \frac{e^{-\rho} - e^{-\rho\xi_2}}{\rho}.$$

Выполнение дифференцирования при использовании обозначения (11) приводит к

$$\frac{3}{\rho^5} \sqrt{S} - \frac{3e^{-\rho\xi_2}}{\rho^5} \left[1 + \rho\xi_2 + (3\xi_2^2 - 1) \frac{\rho^2}{6} \right].$$

Подстановка в (29) приводит, если мы будем теперь писать ξ вместо ξ_2 , к выражению

$$\frac{2\alpha\rho^2}{3} \left[\sqrt{S} \int_1^{\infty} d\xi e^{-\rho\xi} (\dots) - \int_1^{\infty} d\xi e^{-2\rho\xi} \left(1 - \frac{\rho^2}{6} + \rho\xi + \frac{\rho^2}{2} \xi^2 \right) (\dots) \right]. \quad (30)$$

Согласно значению фигурных скобок в (29) и в силу формул (19) и (19б) дополнения 6, мы имеем:

$$(\dots) = -\frac{3}{5} \xi + \frac{6}{5} P_2(\xi) \ln \frac{\xi+1}{\xi-1} = \frac{3}{5} (-\xi + F(\xi)),$$

$$F(\xi) = (3\xi^2 - 1) \ln \frac{\xi+1}{\xi-1}.$$

Положим:

$$\varphi(\rho) = \int_1^{\infty} d\xi e^{-\rho\xi} (-\xi + F(\xi)) \quad (31)$$

и соответственно

$$\varphi(2\rho) = \int_1^{\infty} d\xi e^{-2\rho\xi} (-\xi + F(\xi)). \quad (31a)$$

Тогда мы сможем написать вместо (30):

$$\frac{2\alpha\rho^2}{5} \left[\sqrt{S} \varphi(\rho) - \left(1 - \frac{\rho^2}{6} \right) \varphi(2\rho) + \frac{\rho}{2} \frac{\partial \varphi(2\rho)}{\partial \rho} - \frac{\rho^2}{8} \frac{\partial^2 \varphi(2\rho)}{\partial \rho^2} \right]. \quad (32)$$

Итак, нам осталось лишь вычислить $\varphi(\rho)$. Прежде всего очевидно, что

$$-\int_1^{\infty} d\xi \xi e^{-\rho\xi} = \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{e^{-\rho}}{\rho} = -\frac{e^{-\rho}}{\rho^2} (1 + \rho), \quad (32a)$$

$$\int_1^{\infty} d\xi e^{-\rho\xi} F(\xi) = \left(3 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - 1 \right) \int_1^{\infty} d\xi e^{-\rho\xi} \ln \frac{\xi+1}{\xi-1}. \quad (32b)$$

Последний интеграл мы разложим на $J_+ - J_-$ и вычислим:

$$J_+ = \int_1^{\infty} d\xi e^{-\rho\xi} \ln(\xi+1) = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln 2 + \frac{e^{\rho}}{\rho} \int_{\frac{\rho}{2}}^{\infty} e^{-y} \frac{dy}{y}$$

и

$$J_- = \int_1^{\infty} d^2 e^{-\rho^2} \ln(\xi - 1) = -\frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln \rho + \frac{e^{-\rho}}{\rho} \int_0^{\infty} e^{-y} \ln y dy.$$

Интеграл в правой части последней строки равен постоянной Эйлера со знаком минус: $-C = -0,57721\dots$ Интеграл в правой части предпоследней строки приводит к «интегральной показательной функции»:

$$\text{Ei}(-x) = -\int_x^{\infty} e^{-y} \frac{dy}{y} \quad (32a)$$

и равен $-\text{Ei}(-2\rho)$. Мы имеем, следовательно,

$$J_+ = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln 2 - \frac{e^{-\rho}}{\rho} \text{Ei}(-2\rho).$$

и

$$J_- = -\frac{e^{-\rho}}{\rho} (\ln \rho + C) = -\frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln \rho \gamma, \quad \text{где } C = \ln \gamma.$$

Благодаря этому

$$J_+ - J_- = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln 2\rho\gamma - \frac{e^{-\rho}}{\rho} \text{Ei}(-2\rho).$$

Отсюда мы получаем для (31), учитывая (32a) и (32b):

$$\varphi(\rho) = -\frac{e^{-\rho}}{\rho^2} (1 + \rho) + \left(3 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - 1\right) \left[\frac{e^{-\rho}}{\rho} \ln 2\rho\gamma - \frac{e^{-\rho}}{\rho} \text{Ei}(-2\rho)\right].$$

Выполнение дифференцирования даёт:

$$\varphi(\rho) = -\frac{e^{-\rho}}{\rho^2} (7 + \rho) + \frac{6}{\rho^3} \sqrt{S} \ln 2\rho\gamma - \frac{6}{\rho^3} \sqrt{S'} \text{Ei}(-2\rho), \quad (33)$$

где по аналогии с (11) положено:

$$\sqrt{S'} = \left(1 - \rho + \frac{\rho^2}{3}\right) e^{+\rho},$$

благодаря чему S' получается из S заменой $+\rho$ на $-\rho$. Мы используем далее временно обозначения S_2 и S'_2 для тех выражений, которые получаются из S и S' при замене ρ на 2ρ .

Тогда, согласно (33), явное выражение для $\varphi(2\rho)$ будет гласить:

$$\varphi(2\rho) = -\frac{e^{-2\rho}}{4\rho^2} (7 + 2\rho) + \frac{6}{8\rho^3} \sqrt{S_2} \ln 4\rho\gamma - \frac{6}{8\rho^3} \sqrt{S'_2} \text{Ei}(-4\rho). \quad (33a)$$

Остаётся ещё выполнить над этим выражением предусмотренные в (32) дифференцирования, после чего мы получим окончательно для полного выражения (32):

$$-\frac{\alpha}{5} \left(-\frac{25}{8} + \frac{23}{4}\rho + 3\rho^2 + \frac{\rho^3}{3}\right) e^{-2\rho} + \frac{6}{5} \frac{\alpha}{\rho} \left\{S \ln \gamma\rho + S' \text{Ei}(-4\rho) - 2\sqrt{SS'} \text{Ei}(-2\rho)\right\}. \quad (34)$$

Этот результат был получен Сугиура (см. примечание 4 на стр. 524), вычисления которого шли, однако, по несколько иному пути.

8. Теперь мы можем собрать все члены, из которых складывается обменное взаимодействие A . Такими являются (14), (34) и удвоенное, взятое

с обратным знаком (16). В целом находим:

$$\frac{A}{\alpha} = \frac{S}{\rho} - \left(\frac{11}{8} + \frac{103}{20} \rho + \frac{49}{15} \rho^2 + \frac{11}{15} \rho^3 \right) e^{-2\rho} + \frac{6}{5\rho} \left[S \ln \gamma \rho + S' \operatorname{Ei}(-4\rho) - 2\sqrt{SS'} \operatorname{Ei}(-2\rho) \right]. \quad (35)$$

С помощью известных разложений¹⁾ для $\operatorname{Ei}(-x)$ для малых ρ получается:

$$\frac{A}{\alpha} = \frac{1}{\rho} - \frac{11}{8} - \frac{1}{3} \rho + \dots, \quad (35a)$$

т. е. крутое падение от очень больших положительных вплоть до отрицательных значений, а для больших — экспоненциальное приближение к нулю с отрицательной стороны. Поэтому, как и утверждалось в предыдущем параграфе, для не слишком малых ρ A является отрицательным. Минимум A лежит между $\rho = 1$ и $\rho = 2$. Такое поведение A совместно с представляющим S уравнением (20) доказывают приводившийся ранее рис. 47; сделанные там утверждения относительно численных значений постоянных ($r_{\text{чнл}}$, $e_{\text{чнл}}$ и т. д.) можно теперь проконтролировать с помощью наших выражений для A и S .

§ 5. ВОЛНОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ ПОНИМАНИЕ ПРИНЦИПА ПАУЛИ

Различие между симметричными и антисимметричными собственными функциями у He и H_2 относилось пока лишь к координатам обоих электронов. Мы знаем, однако, что полное описание состояния требует рассмотрения также и спинов электронов. Мы, конечно, не можем применить к нашим двухэлектронным системам строгую дираковскую теорию спина. Однако мы можем производить вычисления, пользуясь схематическими спиновыми функциями σ , принимающими лишь два значения соответственно двум значениям $\pm \frac{1}{2}$ спинового квантового числа, которое мы будем обозначать через m_1 для первого и m_2 для второго электрона.

В нулевом приближении, т. е. в пренебрежении всяким спиновым взаимодействием, мы получаем следующие комбинации спиновых квантовых чисел

m_1	m_2	m_s *)	Спиновые собственные функции
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	$a = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)$
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$b = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$c = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)$
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	$d = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)$

*) $m_s = m_1 + m_2$.

и спиновых функций. Собственные функции a, b, c, d получены в этом приближении как произведения одночастичных функций совершенно так же, как u и v

¹⁾ Янке и Эмде, Таблицы функций, М., Гостехиздат, 1948, стр. 98.

в (2.5). Из них a и d не вырождены, точно так же, как ранее основное состояние He; напротив, b и c имеют то же самое обменное вырождение, что и возбуждённые состояния гелия. Чтобы снять это вырождение, надо ввести взаимодействие, зависящее от спинов, и провести те же вычисления по теории возмущений, что и ранее для He. При этом окажется, что двумя комбинациями, к которым непрерывно примыкают собственные функции первого приближения, являются $b \mp c$. Собственные же функции первого приближения, возникающие из невырожденных состояний a и d , будут, конечно, непрерывно примыкать к самим a и d . Мы придём, следовательно, к трём собственным функциям, симметричным в спинах, и к одной антисимметричной; именно в нулевом приближении к

$$a, b + c, d \text{ или же } b - c. \quad (1)$$

Первые три составляют возможные ориентации триплета, в то время как последняя представляет собой синглет. Квантовыми числами m_s , соответствующими выписанным функциям, будут:

$$m_s = +1, 0, -1 \text{ или же } m_s = 0. \quad (2)$$

Полную собственную функцию в нулевом приближении мы составим как произведение из координатной и спиновой собственных функций. При этом сначала окажутся возможными две группы по четыре комбинации:

$$\begin{aligned} \text{группа 1) } (u + v) \left\{ \begin{array}{c} a \\ b + c \\ d \end{array} \right\}, & \quad (u - v)(b - c); \\ \text{группа 2) } (u + v)(b - c), & \quad (u - v) \left\{ \begin{array}{c} a \\ b + c \\ d \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Наше разделение на 1) и 2) проведено таким образом, что все состояния группы 1) сохраняют свой знак при перестановке обоих электронов (симметричные состояния), а состояния группы 2) — меняют свой знак (антисимметричные состояния). Можно непосредственно показать, что переходы между симметричными и антисимметричными состояниями запрещены. При этом здесь идёт речь о *строгом* интеркомбинационном запрете в отличие от рассмотренного в (2.18), который выполнялся лишь приближённо и зависел от малости (см. стр. 529) спинового взаимодействия. Следовательно, если бы реализовалось одно из состояний группы 1), то оно никогда не могло бы комбинировать ни с одним из состояний группы 2). Таким образом, обе группы взаимно исключают друг друга, и притом так, что из чисто теоретических соображений нельзя заключить, какая группа реализуется в природе.

Мы можем, однако, придти к определённом выводу, если будем исходить из известных из опыта свойств спектра гелия, даже если забудем временно о принципе Паули и его исчерпывающем подтверждении в спектроскопии и в теории периодической системы. В случае группы 1) парасистема, которой мы должны были приписать функцию $u + v$, была бы триплетной, а ортосистема — синглетной. На самом же деле дело обстоит как раз наоборот. Следовательно, комбинация 1) выпадает; комбинация 2) оказывается единственно допустимой с точки зрения опыта.

К тому же выводу приводит и рассмотрение системы H_2 . И здесь симметричные в координатах собственные функции, например основное состояние (ср. стр. 538), оказываются согласно опытной проверке относящимися к синглетным термам, а антисимметричные — к триплетным. Это опять при-

водит к группе 2) как к единственно дозволённому характеру симметрии собственных функций.

Обобщая теперь эти положения, мы приходим к волномеханической формулировке принципа Паули. Собственные функции каждой системы, построенной из электронов, *антисимметричны*, это значит, что они меняют свой знак, если мы переставим все квантовые числа, определяющие состояние какого-либо электрона, с такими же числами другого электрона.

Эта формулировка включает прежнее элементарное понимание принципа Паули, согласно которому каждое полностью определённое квантовое состояние могло быть занято только одним электроном. Действительно, если бы в одном квантовом состоянии находилось два электрона, то собственная функция системы одинаковым образом зависела бы от четырёх определяющих состояние чисел (четырёх квантовых чисел) обоих электронов и должна была бы оставаться поэтому неизменной при перестановке этих электронов; так как, с другой стороны, она обязана менять при этом знак, то она должна равняться нулю. Но это означает, что состояние не существует.

В волномеханической формулировке заключено также и утверждение, служащее для завершения принципа Паули. Электроны не обладают индивидуальностью, их нельзя отличить друг от друга и приписать определённым электронам определённые номера. В самом деле, на примерах He и H₂, мы видели, что волновое уравнение, которое определяет нашу волновую функцию, оставалось неизменным, если мы меняли номера 1 и 2 электронов. То же самое справедливо и для любых электронных систем.

Мы найдём формальное выражение для антисимметрии системы электронов, если напишем волновую функцию в виде *детерминанта*. Пусть q_1 объединяет пространственные и спиновые координаты «первого» электрона, q_2 — «второго» и т. д. Пусть состояние первого электрона задаётся функцией ψ_1 , второго — ψ_2 и т. д., причём каждое состояние мыслится полностью определённым в квантовом смысле. Для того чтобы это можно было сделать для каждого отдельного электрона, надо, конечно, отвлечься от взаимодействия между электронами (в выключении внешнего поля нет необходимости).

Учтём теперь, что нумерация электронов произвольна. Вместо того чтобы приписывать электронам 1, 2, ..., N квантовые состояния 1, 2, ..., N , мы могли бы приписать эти состояния какой-либо перестановке последовательности 1, 2, ..., N . Все получающиеся таким образом функции мы должны объединить в линейную комбинацию, которая удовлетворяет паулевскому требованию антисимметрии. Это достигается сразу записью в виде детерминанта

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \dots & \psi_N(q_1) \\ \psi_2(q_2) & \dots & \psi_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(q_1) & \dots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (3)$$

В самом деле, все члены детерминанта получаются из диагонального члена

$$\psi_1(1)\psi_2(2)\dots\psi_N(N),$$

который соответствует нашему первоначальному написанию волновой функции системы, путём совершения всех возможных перестановок. Антисимметричный характер Ψ следует при этом немедленно из изменения знака детерминанта при перестановке двух строк, а запрещение двойного заполнения одного

квантового состояния — из обращения в нуль детерминанта при равенстве двух столбцов.

Согласно сказанному выше представление (3) пригодно только в нулевом приближении в пренебрежении взаимодействием электронов. Чтобы прийти к первому приближению, и здесь необходимо прибегнуть к процедуре теории возмущений.

Подчеркнём ещё раз, что наш выбор антисимметричного класса был обусловлен требованиями опыта. Кроме электронов, тот же выбор справедлив, как мы увидим в § 6 и 7, и для протонов и нейтронов. Наоборот, для α -частиц и других ядер с чётным числом частиц осуществляется (ср. § 7) противоположная возможность, то есть симметричный класс. Сам Паули¹⁾ говорит по этому поводу следующее: «Иадо надеяться, что будущая теория элементарных частиц приведёт также и к более глубокому проникновению в сущность этого ограниченного выбора природы»²⁾.

Мы хотели бы ещё указать, каким образом обобщается проведённое выше рассмотрение двухэлектронной системы на многоэлектронные системы. В случае трёх электронов мы получим, если будем выписывать из спиновых квантовых чисел только $m_s = m_1 + m_2 + m_3$ вместо таблицы на стр. 549:

m_s	Спиновые собственные функции
$\frac{3}{2}$	$a = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)$
$\frac{1}{2}$	$b_1 = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right), \quad b_2 = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right),$ $b_3 = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)$
$-\frac{1}{2}$	$c_1 = \sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right), \quad c_2 = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right),$ $c_3 = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(\frac{1}{2}\right)$
$-\frac{3}{2}$	$d = \sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)\sigma\left(-\frac{1}{2}\right)$

Отсюда мы можем образовать симметричные спиновые функции

$$a, \quad b_1 + b_2 + b_3, \quad c_1 + c_2 + c_3, \quad d.$$

Умноженные на одну из антисимметричных в пространственных координатах собственных функций они приводят к удовлетворяющему принципу Паули квартетному терму. Оставшиеся спиновые функции можно скомбинировать в два дублета. Вообще говоря, порядок и число мультиплетов растёт в периодической системе вместе с числом электронов вплоть до некоторого макси-

¹⁾ В. Паули, Общие принципы волновой механики, М., Гостехиздат, 1947, стр. 192. Цитируемая фраза переведена в этом издании неточно. (Прим. ред.)

²⁾ Паули в 1940 г. доказал теорему о связи статистики и спина. Именно, им было в общем виде доказано, что система одинаковых частиц с полуцелым спином описывается антисимметричной волновой функцией (статистика Ферми), а система одинаковых частиц с целым спином — симметричной функцией (статистика Бозе). См. В. Паули, Релятивистская теория элементарных частиц, ИЛ, 1947, стр. 72. (Прим. ред.)

мума, после чего (в конце построения оболочки, когда надо считать не присутствующие, а недостающие электроны) они убывают. Мы сошлёмся здесь на схему т. 1, гл. VIII, § 2, табл. 42 и на работу Хунда¹⁾.

Возвращаясь к спектру гелия, мы хотели бы сказать ещё несколько слов относительно интенсивностей и взаимного расположения составляющих триплета ортогогелия. Следующие рисунки заимствованы из работы Гейзенберга. Вычисления, которые привели к ним, подвергались впоследствии многократному уточнению, последний раз — в работе Араки²⁾. Все три рисунка представляют терм $2p$ с тремя составляющими p_2, p_1, p_0 и относительными статистическими весами 5 : 3 : 1 (т. 1, гл. VIII, § 9). Рассмотрим сначала предельный случай $Z \rightarrow \infty$.

Здесь мы получаем «правильный» порядок следования уровней p_2, p_1, p_0 и нормальное соотношение интервалов 2 : 1, уровень p_2 с наибольшим статистическим весом 5 оказывается самым низким. Для Li^+ мы получаем «частично-обращённый» порядок; «наиболее интенсивный» уровень p_2 лежит в середине. Для He порядок полностью «обращён» по сравнению с нормальным; как известно, этот триплет, интервалы между линиями которого сильно вырождены, рассматривался ранее экспериментально как дублет. Приведённые под рисунками $\Delta\nu$ выражены в $см^{-1}$ и представляют собой опытные значения. Последняя строчка под каждым рисунком содержит в себе отношение интервалов $\Delta\nu: \Delta\nu_1$; для случая He содержание этой строки заимствовано из работы Араки, оно согласуется со значениями, полученными в опытах Хансена и Хустона.

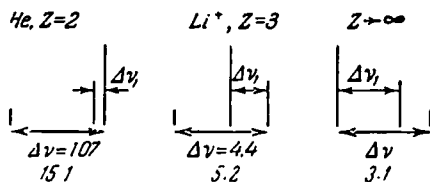


Рис. 49. Триплетное расщепление для He, Li^+ и атома с очень большим зарядом. Статистические веса уровней относятся, как 5 : 3 : 1; для сильно искажённых триплетов He и Li^+ отношения интенсивностей возможно и отклоняются от этих значений.

§ 6. ОРТО- И ПАРАВОДОРОД

Для того чтобы понять опыты, которые будут описаны ниже, мы должны будем приписать не только электрону, но и протону спин $\frac{1}{2}$ и применить принцип Паули не только к электронам, но и к обоим протонам молекулы H_2 . Итак, потребуем в соответствии со стр. 552: собственные функции молекулы H_2 должны быть антисимметричны не только в координатах и спинах электронов, но и в координатах и спинах протонов.

В качестве координат, определяющих положение обоих протонов, будем использовать

$$r_{ab}, \vartheta, \varphi, \quad (1)$$

где r_{ab} означает, как и ранее, расстояние между обоими протонами a и b , ϑ и φ — полярные координаты соединяющей их линии, построенные, например, относительно начала в точке a . Тем самым при перестановке a и b будет $r_{ba} = r_{ab}$, наоборот, углы изменятся: ϑ перейдёт в $\pi - \vartheta$, а φ — в $\varphi \pm \pi$. Это можно проверить, рассмотрев разности декартовых координат:

$$\left. \begin{aligned} x_b - x_a &= r_{ab} \sin \vartheta \cos \varphi, \\ y_b - y_a &= r_{ab} \sin \vartheta \sin \varphi, \\ z_b - z_a &= r_{ab} \cos \vartheta. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

¹⁾ F. Hund, Handb. d. Phys., XXIV, 2-е изд., в частности, относительно квартовых систем на стр. 589, 590.

²⁾ G. Araki, Proc. Phys. Math. Soc. of Japan 19, 128 (1937).

При перестановке a и b левые части меняют здесь знак; то же самое происходит в правой части при только что описанном преобразовании с множителями $\cos \varphi$, $\sin \varphi$ и $\cos \vartheta$, в то время как остальные множители, r_{ab} и $\sin \vartheta$, остаются неизменными.

Рассмотрим сначала *вращательный* терм двух протонов, которые будем считать жёстко связанными, т. е. отвлечёмся от колебательного (II.11.4) и электронного (стр. 135) термов. Как и для всех двухатомных молекул, ротационный терм определяется волновой функцией (II.11.4):

$$\psi_{вр} = P_j^m (\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (3)$$

Благодаря представлению (I.3.166), которое мы запишем в виде:

$$P_j^m = \sin^m \vartheta \frac{d^{j+m} (\cos^2 \vartheta - 1)^j}{d^{j+m} \cos \vartheta},$$

P_j^m получает при преобразовании

$$\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta, \quad \varphi \rightarrow \varphi \pm \pi$$

множитель $(-1)^{j+m}$, следовательно, выражение (3) — множитель

$$(-1)^{j+2m} = (-1)^j. \quad (4)$$

Итак, вращательные термы антисимметричны в обоих ядрах для нечётного j и симметричны для j чётного.

С другой стороны, волновые функции колебательных термов зависят лишь от r_{ab} и потому всегда симметричны. То же самое справедливо и для электронного терма в основном состоянии, который представляется, согласно (3.3), (3.5), (3.7), в виде:

$$\psi_{эл} = N_+ (\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2)) \quad (5)$$

и остаётся потому неизменным не только при перестановке электронов 1 и 2, но и при перестановке протонов a и b . Поэтому полная собственная функция

$$\Psi = \psi_{вр} \psi_{кол} \psi_{эл} \quad (6)$$

по отношению к координатам (1) протонов

симметрична при чётном j ,
антисимметрична при нечётном j .

Согласно принципу Паули она должна быть всегда антисимметричной по отношению к перестановке всех координат протонов, т. е. с включением спинов протонов. Мы можем поэтому написать следующую таблицу:

j	Расположение спинов	Суммарный спин = S	Статистический вес = $2S + 1$	Название
Чётное	$\uparrow\downarrow$	0	1	Параводород
Нечётное	$\uparrow\uparrow$	1	3	Ортоводород

Здесь S представляет собой (измеренную в величинах \hbar) сумму спинов

$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$, а «статистический вес» $2S + 1$ совпадает с числом возможных ориентаций в магнитном поле и определяет поэтому мультиплетность терма. Названия пара и орто образованы по аналогии с атомом гелия, с той, однако, разницей, что теперь они относятся к спинам протонов, а не электронов, как то было в случае гелия. Кроме того, надо заметить, что из химических и термодинамических соображений для молекулы H_2 интересуются главным образом основным состоянием и применяют обозначения орто и пара специально к нему, как сделали и мы выше. Напротив, для гелия основное состояние реализуется, как мы знаем, только для парасистемы и запрещено в ортосистеме; следовательно, в этом случае различие между обеими системами приобретает силу только для возбуждённых состояний.

Рассмотрим сначала газ, состоящий из молекул H_2 в основном электронном состоянии при комнатной температуре. Этой температуры как раз хватает для возбуждения вращательных состояний с $j > 0$, но не для возбуждения высших электронных состояний. Молекулы распределяются между ротационными состояниями с различными j в соответствии с больцмановским множителем [ср. т. I, (IX.5.2)], но так, что в ортосостояния (нечётное j) попадает втрое больше молекул, чем в парасостояния, соответственно отношению спиновых статистических весов 3:1. Мы можем не говорить здесь о ротационных статистических весах $2j + 1$, которые можно объединить с больцмановским множителем.

Далее, переходы между орто- и парасостояниями запрещены, как и в атоме гелия (стр. 529), так как возникающие матричные элементы обращаются в нуль. Поэтому если мы изменим температуру, то обе составные части водородного газа не смогут придти в термодинамическое равновесие. Однако по мере уменьшения температуры внутри ортосистемы максимум чисел заполнения будет смещаться от больших значений j к меньшим; то же самое будет происходить и в парасистеме. Но общее число ортомолекул, равно как и парамолекул, будет сохраняться. Напротив, в состоянии полного термодинамического равновесия при $T \rightarrow 0$ все молекулы должны были бы перейти в состояние $j = 0$, принадлежащее парасистеме.

Заслугой Деннисона¹⁾ является впервые достигнутое на этом пути объяснение поведения вращательной теплоёмкости газообразного водорода при низких температурах. Попытки вычисления этого поведения (ср. т. I, гл. IX, § 5), исходя из термодинамических правил для одного газа приводили к неразрешимым противоречиям с опытом. Только вычисления Деннисона, который оперировал со смесью двух газов в соотношении 3:1, смогли объяснить нмевшиеся наблюдения.

Весьма поучительно обратить внимание на то, что здесь проявляются в макроскопических наблюдениях спин протонов, принцип Паули и интеркомбинационный запрет орто- и парасостояний. То же справедливо для открытого недавно тяжёлого водорода — так называемого дейтерия.

Мы извлечём из интеркомбинационного запрета ещё одно следствие. Оно относится как к чистым вращательным полосам молекулы H_2 , так и к колебательно-вращательным полосам. В общем случае для таких полос действует как следствие свойств шаровых функций правило отбора (II.11.16), которое удовлетворяется только комбинациями чётных j с нечётными. Но такие комбинации запрещены для основного состояния молекулы H_2 . Поэтому

¹⁾ D. M. Dennison, Proc. Roy. Soc. 115, 483 (1927).

вращательные и вращательно-колебательные полосы не могут возникать в спектре H_2 за счёт дипольных переходов.

Остановимся ещё кратко на возбуждённых состояниях молекулы H_2 , комбинации которых (друг с другом или с основным состоянием) дают начало линейчатому спектру. Мы также будем обозначать их словами орто или пара, судя по тому, является ли собственная функция Ψ из (6) симметричной или антисимметричной в пространственных координатах обоих протонов. И эти пара- и ортосостояния в расширенном смысле не комбинируют между собой. Поэтому возникающие линии получаются обязательно из комбинации двух орто- или же двух паратермов, следовательно, они сами также могут быть названы орто- или паралиниями.

Если мы представим теперь себе выражения (6) для двух комбинирующих термов, то согласно сказанному выше Ψ будет обладать *одинаковым* характером симметрии, а $\psi_{вн}$, наоборот, противоположным (речь идёт всё время о симметрии по отношению к пространственным координатам протонов) из-за правила отбора $j \rightarrow j \pm 1$. Так как мы можем отвлечься от множителя $\psi_{кя}$, который (будучи всегда чётной функцией координат ядер) не меняет симметрии, то мы должны заключить, что электронные термы $\psi_{эл}$ имеют для двух комбинирующих состояний противоположный характер симметрии. Мы действительно знаем, что кроме основного состояния (5), симметричного в протонах, есть ещё и соответствующий антисимметричный терм, которому соответствует на рис. 47 верхняя кривая ε . В системе возбуждённых состояний таких термов имеется неограниченное множество, так же как и симметричных. Таким образом, мы приходим к выводу, что могут комбинировать только электронные термы разных систем. Если бы мы, например, потребовали, чтобы для чистой вращательной полосы молекула находилась как до, так и после ротационного перехода в основном электронном состоянии, то мы пришли бы к выводу о невозможности таких чисто ротационных полос.

Рассмотрим, наконец, не отдельный переход, но бесконечную последовательность переходов, образующих определённую вращательную полосу (точнее, определённую ветвь такой полосы; ср. т. I, гл. IX, § 3, рис. 140). Вся такая последовательность соответствует одному и тому же электронному переходу, равно как одному и тому же переходу между колебательными состояниями, но вращательный переход меняется от одной линии полосы к другой: за линией, отвечающей вращательному переходу чётное $j \rightarrow$ нечётное j , непосредственно следует линия: нечётное $j \rightarrow$ чётное j .

Если первому из этих переходов отвечает ортолиния, то второму — паралиния, ибо как электронные, так и колебательные термы в начальном и в конечном состоянии были для обоих переходов одними и теми же. Оргомолекул (в возбуждённых состояниях, так же как и в основном) втрое больше, чем парамолекул.

Мы должны, таким образом, ожидать, что интенсивности следующих друг за другом линий в полосе будут меняться в отношении 3:1. Это в полной мере подтверждается спектроскопическими наблюдениями. В следующем параграфе мы увидим, что аналогичное чередование интенсивностей происходит вообще для всех молекул из двух одинаковых атомов, и получим отсюда важные следствия относительно строения ядра. Здесь же следует ещё отметить, что хотя больцмановский множитель (включающий и статистический вес $2j + 1$) и обуславливает постепенное возрастание и последующее убывание интенсивности линий внутри вращательной полосы, но не может заметным образом исказить отношения интенсивностей 3:1 двух непосредственно следующих друг за другом линий полосы.

§ 7. ВОПРОСЫ СТРОЕНИЯ ЯДРА.
СТАТИСТИКА БОЗЕ И СТАТИСТИКА ФЕРМИ

Первоначально считали, что ядра построены из протонов и электронов (ср. например, стр. 178, т. 1 этой книги в издании 1931 г). Немедленно после открытия нейтрона (Чадвик, 1932) Гейзенберг высказал¹⁾ другое предположение, что ядра построены из протонов и нейтронов²⁾. Это предположение оказалось основным для всего дальнейшего развития ядерной физики. Если обозначить через Z порядковый номер, через A массовое число, равное округлённому до целого числа атомному весу, то число протонов в каждом ядре будет равно Z , а число нейтронов $A - Z$. Предложение Гейзенберга шло, однако, дальше, приписывая нейтрону, так же как и протону, спин $1/2$ и подчиняя каждую систему нейтронов принципу Паули. Спин нейтрона, равный $1/2$, исключает все попытки объяснить нейтрон как тесную комбинацию протона с электроном; его следует рассматривать как самостоятельную элементарную частицу.

Наряду с механическим нейтрону надо приписать и *магнитный момент*. Этого требует открытие тяжёлого ядра водорода, так называемого дейтрона (Юри, 1932). Это ядро, являющееся соединением протона и нейтрона, обладает спином 1 и магнитным моментом, отличным от магнитного момента протона. Мы получаем, следовательно, для нейтрона магнетизм без заряда в полной противоположности с восходящими к Амперу представлениями о природе магнетизма.

Согласно постулированному принципу Паули собственная функция ядра, построенного из протонов и нейтронов, должна быть в такой же мере антисимметрична в пространственных и спиновых координатах нейтронов, как и в координатах протонов. То же самое имеет место и для системы, построенной из двух идентичных ядер a и b . Пусть Z будет, как и ранее, числом протонов, а $N = A - Z$ — числом нейтронов обоих одинаковых ядер. Если мы переставим один нейтрон из b с одним нейтроном из a , то собственная функция нашей системы умножится на -1 . То же самое будет и при перестановке одного протона из b с одним протоном из a . Поэтому если мы переставим все N нейтронов и все Z протонов, т. е. все ядро b со всем ядром a , то собственная функция умножится на

$$(-1)^{N+Z} = (-1)^A = \begin{cases} +1, & A \text{ чётное,} \\ -1, & A \text{ нечётное.} \end{cases} \quad (1)$$

Итак, в зависимости от обоих ядер (а не от составляющих их элементарных частиц) собственная функция нашей системы ведёт себя симметрично или антисимметрично, судя по тому, является ли массовое число A чётным или нечётным. То же самое справедливо и для совокупности произвольного числа одинаковых ядер a, b, c, \dots

Поэтому, если мы займёмся установлением статистики таких ядер, как для электронов в металлах, то ядра с чётными A будут вести себя совсем иначе, чем ядра с нечётными A . Последние удовлетворяют принципу Паули, в то время как для первых принцип Паули не выполняется, но зато имеет место требование симметрии.

Симметричная статистика была впервые развита Бозе для световых квантов и распространена Эйнштейном на газовые молекулы. Мы будем

¹⁾ W. Heisenberg, *Zs. f. Phys.* 77, 1 (1932).

²⁾ Предположение, что ядра построены из протонов и нейтронов было опубликовано также Д. Д. Иваненко [*Nature* 129, 798 (1932)]. (*Прим. ред.*)

называть её *статистикой Бозе*. Антисимметричная статистика была исследована почти одновременно Ферми и Дираком. Она называется *статистикой Ферми*. Итак, мы заключаем: ядра с чётным массовым числом подчиняются статистике Бозе, ядра с нечётным массовым числом — статистике Ферми.

В этом общем законе содержатся, конечно, как крайние частные случаи для $A = 1$ и то, что протоны или нейтроны подчиняются статистике Ферми, из чего мы исходили в наших рассуждениях. Наоборот, для дейтона ($A = 2$) и для ядра гелия ($A = 4$) из него следует статистика Бозе. Рассмотрим теперь особенно интересный случай азота, из рассмотрения которого развилась вся задача. Здесь $A = 14$, т. е. согласно протонно-нейтронной модели имеется семь протонов и семь нейтронов. Следовательно, должна иметь место статистика Бозе. Если же, напротив, мы следовали бы старому представлению, то должны были бы принять, что ядро азота состоит из 14 протонов и семи электронов, чтобы получить правильные значения порядкового номера 7 и массового числа 14. Проведённое нами выше рассмотрение двух одинаковых ядер a и b мы могли бы выполнить, естественно, и для протонно-электронной системы, так как и в этом случае элементарные частицы подчиняются принципу Паули. Но тогда при полной перестановке всех частиц обоих сортов возник бы множитель

$$(-1)^{14+7} = (-1)^{21} = -1,$$

т. е. статистика Ферми. Как мы увидим, это противоречит опытным данным об азоте.

Однако сначала мы хотели бы вывести следствие для полного спина ядра, которое непосредственно вытекает из основных представлений протонно-нейтронной модели. Назовём этот полный спин S . Он складывается из элементарных спинов $\pm \frac{1}{2}$ нейтронов и протонов:

$$S = \sum_1^A \left(\pm \frac{1}{2} \right). \quad (2)$$

Отсюда немедленно следует, что

$$S = \begin{cases} \text{целому,} & A \text{ чётное,} \\ \text{полуцелому,} & A \text{ нечётное.} \end{cases} \quad (3)$$

Следовательно, в периодической системе целые и полуцелые спины встречаются попеременно. Это правило оказывается выполняющимся без исключений. Кроме того, опыт приводит к правилу, также не имеющему исключений, что для значений A вида $4n$ полный спин S равен нулю, следовательно, происходит полная компенсация спинов элементарных частиц. То же самое выполняется и для значений A вида $4n + 2$, если только как Z , так и N являются чётными. Напротив, $S = 1$ для

$$A = 2 \text{ (дейтон),} \quad A = 14 \text{ (азот),}$$

когда как Z , так и N оба являются нечётными. Для нечётных значений A наиболее часто встречаются $S = \frac{1}{2}$ и $S = \frac{3}{2}$, но встречаются и большие значения, например $S = \frac{9}{2}$ для висмута (Бекк и Гаудсмит, зеemanовское расщепление).

Отсюда мы непосредственно получаем общее правило чередования интенсивностей во вращательных спектрах как обобщение чередования интенсивностей в отношении 3:1 в спектрах орто- и параводорода (ср. стр. 556).

В магнитном поле ядерный спин S может устанавливаться $2S+1$ способами, именно его составляющие по направлению магнитного поля могут принимать значения:

при целом S

$$S, S-1, \dots, 1, 0, -1, \dots, -S+1, -S,$$

при полуцелом S

$$S, S-1, \dots, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \dots, -S+1, -S.$$

Для двух объединённых в одной молекуле ядер спина S существует всего $(2S+1)^2$ возможных ориентаций. Представим их записанными в виде квадратной таблицы, в каждой клетке которой размещена комбинация спиновых собственных функций обоих ядер $\sigma(i)$ ($S \geq i \geq -S$, первое ядро) и $\sigma(k)$ ($S \geq k \geq -S$, второе ядро). Числа i и k являются целыми или полуцелыми в зависимости от целости или полуцелости S .

При этом можно считать, например (ср. рис. 50), что индекс i меняется на единицу при переходе от столбца к столбцу, а индекс k — от строки к строке. На диагонали наша схема содержит симметричные комбинации $\sigma(i)\sigma(i)$, в то время как пары симметричных относительно диагонали клеток отличаются друг от друга лишь заменой комбинации $\sigma(i)\sigma(k)$ на комбинацию $\sigma(k)\sigma(i)$. Мы симметризуем или антисимметризуем эти последние, образуя комбинации:

$$\left. \begin{aligned} \sigma(i)\sigma(k) + \sigma(k)\sigma(i), \\ \sigma(i)\sigma(k) - \sigma(k)\sigma(i). \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Таких комбинаций будет всего

$$\frac{1}{2} \{ (2S+1)^2 - (2S+1) \} = S(2S+1), \quad (5)$$

именно столько, сколько на нашей таблице недиагональных клеток. Это число как раз равняется общему количеству антисимметричных комбинаций. Общее число симметричных комбинаций получится, если мы добавим сюда ещё и $2S+1$ диагональных комбинаций, следовательно, составит:

$$(S+1)(2S+1). \quad (6)$$

Вследствие этого для отношения числа симметричных комбинаций к числу антисимметричных мы получаем:

$$\frac{S+1}{S}. \quad (7)$$

Это вычисление, специализированное для случая $S = \frac{1}{2}$, является не чем иным, как уже проведенным на стр. 550 рассмотрением, которое было

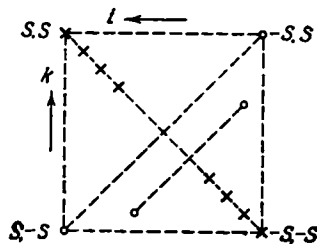


Рис. 50. Схема возможных ориентаций спинов двух ядер (целого или полуцелого) спина S . Крестиками обозначены изначально симметричные комбинации ориентаций обоих спинов; симметрично расположенным относительно диагонали кружками обозначены такие пары комбинаций, из которых строятся симметричная и антисимметричная спиновые функции.

применено там к атому гелия и перенесено на стр. 555 на молекулу водорода. Нашим теперешним диагональным членам там соответствовали спиновые функции a и d , а недиагональным — b и c , а комбинациям (4) — прежние $b+c$ и $b-c$; из последней формулы (7) для случая $S = \frac{1}{2}$ получается прежнее отношение 3:1 числа симметричных и антисимметричных комбинаций.

Так же как и в случае спектра H_2 , выражение (7) определяет в общем случае чередование интенсивностей следующих друг за другом линий во вращательной полосе как в случае статистики Бозе, так и в случае статистики Ферми.

Для случая $S = 0$ из (7) получается для соотношения интенсивностей 1:0, что означает, что каждая вторая линия в полосе вовсе пропадает. Примером могут служить полосы He_2 , о которых шла речь в т. I, гл. IX, § 5. То же самое в соответствии с приведённым выше правилом, что все ядра с делящимся на 4A обладают ядерным спином $S = 0$, выполняется и для полос обыкновенного кислорода $O_{16}O_{16}$. Однако это обстоятельство не имеет места по отношению к полосам $O_{16}O_{18}$ или $O_{16}O_{17}$, так как наши рассуждения симметрии нельзя распространить на такие молекулы из-за нетождественности обоих ядер. И действительно, линии этих спектров расположены вдвое чаще, чем линии полос $O_{16}O_{16}$, и не проявляют чередования интенсивностей. Последнее применимо также и к полосам $C_{12}C_{13}$ и $N_{14}N_{15}$.

Для очень больших S (7) даёт для соотношения интенсивностей предельное значение 1:1, т. е. чередование интенсивностей делается незаметным.

Для полос $N_{14}N_{14}$ интенсивности чередуются в соотношении 2:1, откуда в силу (7) и следует уже упоминавшееся значение $S = 1$. Особенно удобными для исследования являются вращательные полосы в комбинационном спектре азота, которые были исследованы в образцовой работе Разетти (см. цитату на стр. 323). При этом вывод о статистике Бозе следует из особых деталей сделанных Разетти снимков (расположение сильных и слабых линий полосы в окрестности линий падающего излучения) и совершенно не зависит от какой-либо теории строения ядра. Это было отмечено впервые Гайтлером и Герцбергом¹⁾, на выводы которых опирался Гейзенберг при выдвижении протонно-нейтронной модели ядра.

На этих описанных здесь основах было в последние годы возведено грандиозное здание ядерной физики. Мы, однако, должны вернуться к более простым вопросам атомной волновой механики.

§ 8. РАССЕЯНИЕ ОДИНАКОВЫХ ЧАСТИЦ

Речь будет идти о рассеянии α -частицы на α -частице или протона на протоне. В первом случае волновая функция такой задачи двух тел симметрична в координатах²⁾ обеих частиц (статистика Бозе, спин 0), во втором — антисимметрична (статистика Ферми, спин $\frac{1}{2}$). В обоих случаях задача двух тел сводится путём отделения движения центра тяжести к точно интегрируемой задаче одного тела (задаче водорода) в относительных координатах.

Обозначим пространственные координаты рассеянной и рассеивающейся частиц через r_1 и r_2 , а их относительные координаты — через $r = r_1 - r_2$. Волновую функцию относительного движения мы запишем, откладывая на дальнейшее точное определение входящих в неё постоянных k и l , в виде

¹⁾ W. Heitler und G. Herzberg, Naturwissen. 17, 673 (1929).

²⁾ Для α -частиц речь идёт о пространственных координатах, для протонов или электронов — о пространственных и спиновых координатах.

(VII.2.4):

$$\psi(r_1, r_2) = e^{i(kr)} L_n(\rho), \quad \rho = i\{kr - (kr)\}. \quad (1)$$

При перестановке обеих частиц происходит замена

$$r \rightarrow -r, \quad r \rightarrow r, \quad \rho \rightarrow \sigma = i\{kr + (kr)\}. \quad (2)$$

Вследствие этого волновая функция с переставленными аргументами гласит:

$$\psi(r_2, r_1) = e^{-i(kr)} L_n(\sigma). \quad (3)$$

Мы образуем из (1) и (3) симметричную и антисимметричную комбинации:

$$\Psi = \psi(r_1, r_2) \pm \psi(r_2, r_1). \quad (4)$$

Благодаря движению центра тяжести мы должны были бы добавить сюда, чтобы получить полную волновую функцию задачи двух частиц, ещё и множитель γ (стр. 84), который зависит от координат центра тяжести. Так как, однако, этот множитель не меняется при перестановке частиц 1 и 2 и, кроме того, его абсолютная величина постоянна (ср. стр. 85), то он не играет никакой роли для дальнейших вычислений и его можно поэтому опустить уже в (4).

В задаче о рассеянии нас интересует только асимптотический вид волновой функции Ψ . Он получается из (II.9.25a) и гласит:

$$\Psi = e^{i(kr)} \frac{(-\rho)^n}{\Gamma(1+n)} \pm e^{-i(kr)} \frac{(-\sigma)^n}{\Gamma(1+n)} - \frac{n}{\Gamma(1-n)} (\rho^{-n-1} \pm \sigma^{-n-1}) e^{ikr}. \quad (5)$$

Множитель e^{ikr} во второй строке указывает на то, что она представляет рассеянную волну, первая строка с множителем $e^{\pm i(kr)}$ описывает движение до соударения (падающую волну). образуем отношение рассеянной интенсивности к падающей. При этом мы будем учитывать для падающей волны только первый из двух членов, а для рассеянной оба члена соответственно тому обстоятельству, что падающая интенсивность создаётся только одной из двух частиц, именно налетающей, в то время как рассеянная интенсивность — обеими частицами:

$$\frac{J_{\text{расо}}}{J_{\text{пад}}} = \left| \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(1-n)} \right|^2 |z|^2 |(-\rho)^n|^{-2} |\rho^{-n-1} \pm \sigma^{-n-1}|^2 r^2 d\Omega; \quad (6)$$

здесь $d\Omega$ означает телесный угол, к которому относится измерение рассеянных частиц, следовательно, $r^2 d\Omega$ — поверхность, через которую рассеиваются частицы; падающая волна нормирована таким образом, что через единицу поверхности её волнового фронта проходит в единицу времени одна частица. При такой нормировке (6) сразу даёт дифференциальное эффективное сечение рассеяния (ср. стр. 333), поэтому мы будем в дальнейшем писать для левой части (6) просто dQ . При вычислении (6) надо учитывать, что n чисто мнимо, поэтому первый множитель в правой части оказывается равным единице, а третий вырождается в

$$(-i)^{-n} (+i)^{+n} = e^{i\pi n} = e^{\pi|n|}.$$

Тогда (6) приводится к виду:

$$dQ = C |\rho^{-n-1} \pm \sigma^{-n-1}|^2, \quad C = |n|^2 e^{\pi|n|} d\Omega. \quad (7)$$

Мы обозначим в системе относительных координат через Θ угол между направлением падения r и направлением наблюдения k ($\Theta =$ углу рассеяния в относительных координатах) и получим согласно (1) и (2):

$$\left. \begin{aligned} \rho &= ikr(1 - \cos \Theta) = 2kr \sin^2 \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{\pi}{2}}, \\ \sigma &= ikr(1 + \cos \Theta) = 2kr \cos^2 \frac{\Theta}{2} e^{i \frac{\pi}{2}}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

а для сопряжённых величин

$$\rho^* = -\rho, \quad \sigma^* = -\sigma.$$

Отсюда,

$$\begin{aligned} | \rho^{-n-1} \pm \sigma^{-n-1} |^2 &= \\ &= (\rho^{-n-1} \pm \sigma^{-n-1})(\rho^{n-1} \pm \sigma^{n-1})(-1)^{n-1} = \\ &= \{ \rho^{-2} + \sigma^{-2} \pm \rho^{-1}\sigma^{-1}(\rho^{-n\sigma+n} + \sigma^{-n\rho+n}) \} (-1)^{n-1} = \\ &= (2kr)^{-2} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\Theta}{2}} \pm \frac{1}{\sin^2 \frac{\Theta}{2} \cos^2 \frac{\Theta}{2}} (\dots) \right\} e^{-\pi |n|}. \end{aligned} \quad (9)$$

Чтобы найти выражение, стоящее в круглых скобках (...); введём обозначение

$$\gamma = \ln \operatorname{tg} \frac{\Theta}{2}. \quad (10)$$

Тогда согласно (8) будет:

$$\begin{aligned} \rho^{-n\sigma+n} &= \left(\operatorname{tg}^2 \frac{\Theta}{2} \right)^{-n} = e^{-2n\gamma} = e^{2i|n|\gamma}, \\ \sigma^{-n\rho+n} &= \left(\operatorname{tg}^2 \frac{\Theta}{2} \right)^n = e^{2n\gamma} = e^{-2i|n|\gamma}, \\ (\dots) &= 2 \cos 2|n|\gamma = 2 \cos \left\{ 2|n| \ln \operatorname{tg} \frac{\Theta}{2} \right\}. \end{aligned}$$

С помощью этого значения, а также (8) и (9) получаем из (7):

$$dQ = \frac{|n|^2 d\Omega}{4k^2} \left(\frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\Theta}{2}} \pm \frac{2}{\sin^2 \frac{\Theta}{2} \cos^2 \frac{\Theta}{2}} \cos \left\{ 2|n| \ln \operatorname{tg} \frac{\Theta}{2} \right\} \right). \quad (11)$$

Если бы мы отвлеклись от симметризации собственных функций, то получили бы, конечно, только первый член правой части, который совпадает с формулой Резерфорда (V.6.4), и притом не только в отношении угловой зависимости, но и по величине. Именно, так как падающая частица и частица-мишень обладают одинаковым зарядом eZ ($Z=2$ для α -частиц, $Z=1$ для протонов) и одинаковой массой M ($M=4m_H$ для α -частиц, $M=m_H$ для протонов), то

$$|n| = \frac{\alpha Z^2}{\beta} = \frac{e^2 Z^2}{h\nu}, \quad \frac{|n|}{2k} = \frac{e^2 Z^2}{2k\nu v} = \frac{e^2 Z^2}{2Mv^2}. \quad (11a)$$

Но тем самым (11) совпадает с (V.6.4a). То, что k имеют в обоих уравнениях одно и то же значение, следует из того, что в начальном состоянии процесса соударения при покоящемся ядре наше настоящее волновое число относительного движения совпадает с волновым числом в системе координат, в которой покоилась частица-мишень.

Тем самым мы выяснили значение первого члена в (11). Для того чтобы истолковать остальные члены и быть в состоянии сравнить нашу формулу с наблюдениями, мы должны перейти от рассмотрения относительного движения к соотношениям в системе координат, связанной с наблюдателем. Эта операция поясняется рис. 51.

Здесь p_0 означает начальный импульс падающей частицы, p_1 и p_2 — конечные импульсы падающей частицы и частицы-мишени. В силу закона сохранения импульса выполняется соотношение

$$p_0 = p_1 + p_2,$$

возведение которого в квадрат даёт:

$$p_0^2 = p_1^2 + p_2^2 + 2(p_1 p_2). \quad (12)$$

Кроме того, для частиц одинаковой массы можно записать закон сохранения энергии в виде:

$$p_0^2 = p_1^2 + p_2^2. \quad (13)$$

Из сравнения этого равенства с (12) получаем:

$$(p_1 p_2) = 0, \quad \sphericalangle(p_1, p_2) = \frac{\pi}{2}. \quad (14)$$

Параллелограмм импульсов превращается в прямоугольник, как это известно из элементарной механики ¹⁾.

На рис. 51, кроме импульсов p_0 , p_1 и p_2 , изображён также и относительный импульс $p = p_1 - p_2$, величина которого, как ясно из рисунка, равна диагонали прямоугольника, т. е. совпадает с p_0 . Его угол относительно направления падения налетающей частицы равен как раз углу Θ , участвовавшему в наших предыдущих вычислениях. С другой стороны, угол рассеяния, который возникает на нашем рисунке дважды, как угол между p_1 и p_0 и как, что следует из простой наложимости, угол между p и p_1 , мы обозначим через ϑ . Поэтому получаем:

$$\Theta = 2\vartheta. \quad (14a)$$

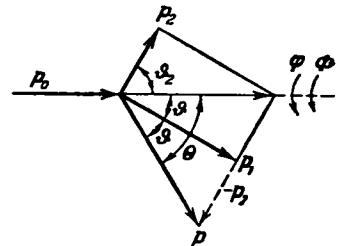


Рис. 51. Прямоугольник импульсов для соударения одинаковых частиц.

Кроме того, согласно (14) имеет место соотношение

$$\vartheta_2 = \frac{\pi}{2} - \vartheta, \quad (14b)$$

где ϑ_2 означает угол $\sphericalangle(p_2, p_0)$, т. е. «угол рассеяния частицы отдачи».

В силу этих обозначений знаменатели обоих первых членов в скобках в (11) станут равными

$$\sin^4 \vartheta \quad \text{и} \quad \sin^4 \vartheta_2.$$

¹⁾ Эта теорема не имеет более силы в релятивистской механике, так как здесь, в силу изменения массы со скоростью, закон сохранения энергии не имеет более формы (13). Это было подтверждено в высшей степени интересными опытами Чемпиона с β -лучами [см. F. C. Champion, Proc. Roy. Soc., A136, 630 и 137, 688 (1932)]. Угол между падающим электроном и электроном отдачи становится по мере роста жёсткости β -лучей всё более острым.

Тем самым становится совершенно ясным значение второго члена: при тождественности падающих частиц и частиц-мишеней частицы отдачи нельзя отличить от рассеянных, поэтому в опыте по рассеянию первые считаются вместе со вторыми.

Мы должны, однако, преобразовать в новые углы ϑ , φ и элемент телесного угла $d\Omega$. Из равенств

$$d\Omega = \sin \Theta d\Theta d\Phi, \quad d\omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

следует в силу (14а)

$$d\Omega = \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta d\varphi = \cos \vartheta d\omega; \quad (14в)$$

при этом надо учитывать, что φ , так же как и Φ (ср. рис. 51), отсчитывается вокруг направления p_0 , поэтому $d\Phi = d\varphi$.

В противоположность первому и второму членам третий член в (11) нельзя понять классически. Действительно, он означает интерференцию волн падающей частицы и частицы отдачи. Мы можем назвать также этот член, который появляется лишь для тождественных частиц, обменным членом. Он не поддается корпускулярному истолкованию, которым мы ещё пользовались на рис. 51. Теоретическое открытие этого члена принадлежит Мотту¹⁾, к работе которого примыкает большое число экспериментальных исследований.

Чтобы обсудить их, перепишем (11) ещё раз, выписывая полностью зависимость от наблюдаемого угла рассеяния ϑ и с учётом значений констант (11), и притом специально для случая рассеяния α -лучей [верхний знак в (11)]:

$$\frac{dQ}{\cos \vartheta d\omega} = \left(\frac{e^2 Z^2}{2Mv^2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4 \vartheta} + \frac{1}{\cos^4 \vartheta} + \frac{2}{\sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta} \cos \{2|n| \ln \operatorname{tg} \vartheta\} \right), \quad (15)$$

$$|n| = \frac{\alpha Z^2}{\beta}.$$

Так как для α -лучей β существенно меньше 1 (для полония $\beta = 1/20$), то для $|n|$ получается значение ~ 1 , поэтому косинус в последнем члене (15) осциллирует заметным образом. В опытах по рассеянию интенсивность усредняется, естественно, по конечному углу, вследствие чего положительные и отрицательные полуволны косинуса компенсируются, в особенности вблизи $\vartheta = 0$ или $\vartheta = \pi$. Поэтому интерференционный член, вообще говоря, трудно обнаружить. Однако иначе обстоит дело при $\vartheta = \frac{\pi}{4}$, когда $\ln \operatorname{tg} \vartheta = 0$ и осцилляции исчезают. Тогда круглые скобки в (15) приводят к значениям:

$$\left(\frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\cos^2 \frac{\pi}{4}} \right)^2 = 16 \text{ с интерференционным членом,}$$

$$\frac{1}{\sin^4 \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\pi}{4}} = 8 \text{ без интерференционного члена.}$$

Эту разницу легко заметить на опыте. И действительно, опыты ряда авторов²⁾ подтвердили наличие интерференционного члена при рассеянии α -частиц

¹⁾ N. E. Mott, Proc. Roy. Soc. A126, 259 (1930); ср. также изложение в книге Мотта и Месса (Теория атомных столкновений), гл. V, § 3. Первое упоминание о необходимости симметризации собственных функций в задаче о столкновениях можно найти у J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. 32, 361 (1928).

²⁾ J. Chadwick, Proc. Roy. Soc. A128, 114 (1930); P. M. S. Blackett а. F. C. Chamberlain, там же 130, 380 (1930). (Статистика снимков в камере Вильсона.)

в газообразном гелии и тем самым и статистику Бозе для α -частиц и их волновую природу.

Несколько сложнее обстоит дело при рассеянии протонов на протонах. В этом случае имеет место, как мы знаем, статистика Ферми. Собственная функция всей системы антисимметрична в координатах обоих протонов. Так как к этим координатам относятся не только пространственные координаты, но и спины, то эта антисимметрия может установиться двумя способами: путём антисимметрии координатной функции при симметричной спиновой функции или же путём симметрии координатной функции при антисимметрии спиновой. Если мы будем обозначать зависящую от пространственных координат часть собственной функции, как и в (4), через $\psi(r_1, r_2)$ или $\psi(r_2, r_1)$, а спиновую часть через $\Phi(s_1, s_2)$ или $\Phi(s_2, s_1)$, то мы сможем записать сначала в качестве выражения для собственной функции:

$$\psi(r_1, r_2) \Phi(s_1, s_2) - \psi(r_2, r_1) \Phi(s_2, s_1). \quad (16)$$

Это выражение можно переписать в виде:

$$\begin{vmatrix} \psi(r_1, r_2) & \psi(r_2, r_1) \\ \Phi(s_2, s_1) & \Phi(s_1, s_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \psi(r_1, r_2) + \psi(r_2, r_1) & \psi(r_1, r_2) - \psi(r_2, r_1) \\ \Phi(s_2, s_1) + \Phi(s_1, s_2) & \Phi(s_2, s_1) - \Phi(s_1, s_2) \end{vmatrix}.$$

Раскрытие последнего детерминанта приводит к комбинациям симметричной пространственной с антисимметричной спиновой частей и антисимметричной пространственной с симметричной спиновой. Перейдём к квадрату модуля волновой функции и просуммируем по различным ориентациям спина. Если мы будем считать неполяризованным как состояние падающих частиц, так и частиц-мишеней, то члены с произведениями выпадут при суммировании и останутся лишь квадраты модулей обоих диагональных членов. При этом окажется, как мы знаем, например, из рассмотрения пара- и ортоводорода, что антисимметричному спиновому состоянию соответствует статистический вес 1, а симметричному — 3. Итак, для квадрата модуля просуммированного состояния (16) мы получим:

$$\frac{1}{4} |\Psi(r_1, r_2) + \Psi(r_2, r_1)|^2 + \frac{3}{4} |\Psi(r_1, r_2) - \Psi(r_2, r_1)|^2. \quad (17)$$

Возникающие здесь члены по отдельности уже нам известны. Переходя сразу к эффективному сечению, мы получим из (11):

$$dQ = \frac{|n|^2 d\Omega}{4k^2} \left(\frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \cos \{2|n| \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}\} \right),$$

или, следуя способу записи уравнения (15),

$$\frac{dQ}{\cos \vartheta d\omega} = \left(\frac{e^2}{2m_n v^2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4 \vartheta} + \frac{1}{\cos^4 \vartheta} - \frac{1}{\sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta} \cos \{2|n| \ln \operatorname{tg} \vartheta\} \right). \quad (18)$$

Из приведённых выше соображений наибольший интерес представляет опять область углов рассеяния, близких к $\vartheta = \frac{\pi}{4}$. Для этого угла круглая скобка в (18) принимает значение

$$\frac{1}{\sin^4 \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\pi}{4}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{4} \cos^2 \frac{\pi}{4}} = 4.$$

Итак, в то время как в бозевском случае интенсивность рассеяния под углом $\vartheta = \frac{\pi}{4}$ вдвое возросла из-за наличия интерференционного члена,

в фермиевском случае она вдвое уменьшается. Опыты Гертсена ¹⁾ (каналовые лучи водорода в водороде) в точности подтвердили это предсказание.

В случае соударения электронов спин и статистика действуют так же, как и в случае соударения протонов. Тут можно упомянуть опыты Вильямса ²⁾ (β -лучи в водороде), которые также дают указание на существование интерференционного члена. Однако для их обсуждения наши нерелятивистские вычисления не могут уже служить более из-за больших скоростей β -частиц. Основы релятивистской теории обсуждаются у Вентцеля ³⁾.

¹⁾ Chr. Gerthsen, Ann. d. Phys. 9, 769 (1931) и Phys. Zs. 38, 833 (1937).

²⁾ E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. A123, 459 (1930). (Статистика фотографий в камере Вильсона.)

³⁾ В пункте 6 цитированной на стр. 507 статьи.

ГЛАВА X

ПРИБЛИЖЁННЫЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

§ 1. МЕТОД ХИЛЛЕРААСА, ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ГЕЛИЯ

Этот удивительно плодотворный численный метод¹⁾ исходит из связи волнового уравнения с развитым в конце дополнения 4, уравнение (16), вариационным принципом Шредингера:

$$\delta \int (H - W\psi^2) d\tau = 0. \quad (1)$$

Здесь H — выражение, определённое уравнением (15а) дополнения 4, которое мы обобщим теперь на случай многих частиц, различаемых индексом α :

$$H = \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_{\alpha}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y_{\alpha}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z_{\alpha}} \right)^2 \right] + V\psi^2. \quad (2)$$

После выполнения варьирования, интегрирования по частям и приравнения нулю множителя при $\delta\psi$ под знаком интеграла в (1) мы получим волновое уравнение в форме (1.6.13):

$$\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \psi + (W - V)\psi = 0. \quad (3)$$

Мы видим из последнего выражения, что введённая сначала в (1) на правах множителя Лагранжа величина W приобретает смысл собственного значения уравнения (3). Чтобы вычислить W , надо помножить (3) на ψ и проинтегрировать по конфигурационному пространству; выполняя в первом члене уже упоминавшееся интегрирование по частям в обратном порядке, мы найдём для каждого решения ψ уравнения (3):

$$- \int H d\tau + W \int \psi^2 d\tau = 0, \quad (4)$$

следовательно,

$$W = \frac{\int H d\tau}{\int \psi^2 d\tau}. \quad (5)$$

Из этого соотношения совместно с вариационным принципом (1) следует, что собственные значения W суть экстремальные значения стоящего в правой

¹⁾ Мы следуем работе Egil A. Hylleraas, Zs. f. Phys. 54, 347 (1929). В ней имеются ссылки на предыдущие работы.

части (5) отношения интегралов. В самом деле, если ψ нормировано, т. е. стоящий в знаменателе (5) интеграл равен единице, то вариация интеграла, стоящего в числителе, обращается в нуль согласно (1). Если же, напротив, нормировка ψ заранее не предусмотрена, что будет удобнее для дальнейших вычислений, то добавление знаменателя означает как раз нормировку стоящего в числителе выражения H , следовательно, вариация правой части (5) опять обращается в силу (1) в нуль. В частности, основному состоянию системы, в котором энергия меньше, чем в любом из возбуждённых состояний, соответствует абсолютный минимум получающегося из (5) экстремального значения.

Однако в дальнейшем мы будем иметь дело не с точными собственными функциями ψ , но с аппроксимирующими функциями, которые, завися от находящихся в нашем распоряжении параметров и удовлетворяют, кроме того, налагаемым на собственные функции граничным условиям и условиям непрерывности. Если мы сделаем теперь выражение (5) путём выбора этих параметров минимальным, то получим приближённые собственные значения задачи. Таким образом, задача переводится из области вариационного исчисления в область обыкновенного дифференциального исчисления и становится доступной для практического нахождения решения.

Мы применим этот приём для нахождения основного состояния гелия, в применении к которому отказал метод Гейзенберга (гл. IX, § 1). Всё вычисление мы разобьём на несколько этапов.

А. Выбор координат. Вместо прямоугольных координат, с которыми мы работали до сих пор, часто вводят такие, которые определяют конфигурацию трёх материальных точек: ядра, электрона 1 и электрона 2, т. е. стороны треугольника

$$r_1, r_2, r_{12}, \quad (6)$$

или, что будет удобнее для дальнейшего, их комбинации¹⁾:

$$s = r_1 + r_2, \quad t = -r_1 + r_2, \quad u = r_{12}. \quad (7)$$

Выразим через них потенциальную энергию

$$V = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} = -e^2 \left(\frac{4Zs}{s^2 - t^2} - \frac{1}{u} \right), \quad (8)$$

где Z для гелия надо положить равным 2.

Для дальнейшего вычисления выражения (2) образуем сначала

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} = \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \frac{x_1}{r_1} + \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \frac{x_1 - x_2}{r_{12}}$$

и т. д. Возводя в квадрат, получаем отсюда:

$$(\text{grad}_1 \psi)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \right)^2 + 2 \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \frac{r_1^2 - (r_1 r_2)}{r_1 r_{12}}, \quad (8a)$$

равно как и

$$(\text{grad}_2 \psi)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \right)^2 + 2 \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_{12}} \frac{r_2^2 - (r_1 r_2)}{r_2 r_{12}}. \quad (8b)$$

Согласно обобщённой теореме Пифагора

$$(r_1 r_2) = \frac{1}{2} (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2), \quad (9)$$

¹⁾ Аналогично эллиптическим координатам $r_a + r_b$ и $r_a - r_b$ в задаче с двумя центрами (IX. 4.2), в которой, однако, третья координата r_{ab} была постоянной (IX. 4.1).

следовательно,

$$r_1^2 - (r_1 r_2) = \frac{1}{2} (r_1^2 - r_2^2 + r_{12}^2) = \frac{1}{2} (-st + u^2) \quad (9a)$$

и

$$r_2^2 - (r_1 r_2) = \frac{1}{2} (r_2^2 - r_1^2 + r_{12}^2) = \frac{1}{2} (st + u^2). \quad (9б)$$

В силу (7)

$$\frac{\partial \psi}{\partial r_1} = \frac{\partial \psi}{\partial s} - \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r_2} = \frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (9в)$$

благодаря чему из (8а, б) получается:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\text{grad}_1 \psi)^2 + \frac{1}{2} (\text{grad}_2 \psi)^2 &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 + \\ &+ \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} - \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{-st + u^2}{(s-t)u} + \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \frac{\partial \psi}{\partial u} \frac{st + u^2}{(s+t)u}. \end{aligned} \quad (10)$$

Это выражение, умноженное ещё на $\frac{\hbar^2}{m}$, составит первый член для H в (2).

Если мы используем введённые на стр. 128 единицы Хартри, т. е. положим $\hbar = 1$, $m = 1$, $e = 1$, то рассматриваемое выражение для H будет равно просто сумме (10) и (8), если мы опустим в (8) множитель e^2 .

Нам остаётся ещё научиться выполнять интегрирование по конфигурационному пространству, для чего нам потребуется построить элемент объёма. Если мы будем использовать полярные координаты обоих электронов, то

$$d\tau = r_1^2 dr_1 \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 d\varphi_1 r_2^2 dr_2 \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 d\varphi_2. \quad (11)$$

Мы будем отсчитывать при этом ϑ_1 , φ_1 относительно неподвижной в пространстве оси, а ϑ_2 , φ_2 — относительно подвижной оси, определяемой вектором r_1 . Тогда будет

$$(r_1 r_2) = r_1 r_2 \cos \vartheta_2$$

и, в силу (9),

$$r_1 r_2 \cos \vartheta_2 = \frac{1}{2} (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2).$$

Дифференцируя это соотношение при постоянных r_1 , r_2 , находим:

$$r_1 r_2 \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 = r_{12} dr_{12},$$

и подстановка в (11) приведёт к

$$d\tau = r_1 r_2 r_{12} dr_1 dr_2 dr_{12} \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 d\varphi_1 d\varphi_2. \quad (11a)$$

Как мы уже отмечали выше, r_1 , r_2 и r_{12} определяют форму и размеры треугольника ядро — электрон 1 — электрон 2; только от этих координат зависят, во всяком случае в основном состоянии, ψ и H . Напротив, углы ϑ_1 , φ_1 и φ_2 определяют положение треугольника в пространстве (их можно считать просто эйлеровыми углами для твёрдого треугольника). При проведении интегрирования в числителе и в знаменателе (5) множители, зависящие от этих углов, выносятся за знак интегрирования по остальным переменным и сокращаются. Поэтому мы можем исключить их из $d\tau$; переходя одновременно к координатам (7), получаем:

$$d\tau = \frac{s^2 - t^2}{4} \begin{vmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial s} & \frac{\partial r_2}{\partial s} \\ \frac{\partial r_1}{\partial t} & \frac{\partial r_2}{\partial t} \end{vmatrix} u ds dt du.$$

Входящий сюда функциональный детерминант имеет, согласно (7), значение

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{vmatrix} = \frac{1}{2},$$

так что мы получаем:

$$d\tau = \frac{1}{8}(s^2 - t^2)u \, ds \, dt \, du. \quad (12)$$

Множитель $1/8$ может здесь, конечно, быть опущен, так же как и ранее была опущена угловая часть, так как он всё равно сократится при образовании отношения (5). То же самое относится и к множителю 2, который появится ниже в (15).

То, что координаты s , t , u выбраны подходящим для нашей задачи образом, проявляется в том, что при образовании $H d\tau$ выпадают все знаменатели, которые входили в (10) и (8). Именно из (12), (10) и (8) после некоторых преобразований получается:

$$\int H d\tau = \int ds \int du \int dt \left\{ (s^2 - t^2)u \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + 2s(u^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial \psi}{\partial u} + 2t(s^2 - u^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial u} + (s^2 - t^2 - 4Zsu) \psi^2 \right\} \quad (13)$$

и соответственно

$$\int \psi^2 d\tau = \int ds \int du \int dt (s^2 - t^2)u \psi^2. \quad (14)$$

Теперь нам осталось ещё установить пределы интегрирования. Из элементарных теорем относительно суммы и разности сторон треугольника получаем согласно (7):

$$u \leq s, \quad |t| \leq u,$$

следовательно, s и u положительны, а t или положительно или отрицательно. s меняется от 0 до ∞ , u — от 0 до s , а t — от $-u$ до $+u$. Следовательно, мы можем сразу написать в интегралах в (13) и (14):

$$\int_0^{\infty} ds \int_0^s du \int_{-u}^{+u} dt \dots$$

Так как, однако, для основного состояния гелия речь идёт о паратерме, т. е. о собственной функции, которая симметрична в координатах, и так как, в отличие от s и u , t меняет свой знак при перестановке электронов 1 и 2, то ψ , а потому и H должны быть чётными функциями t . Следовательно, только что выписанные пределы интегрирования можно заменить (опуская одновременно множитель 2) другими:

$$\int_0^{\infty} ds \int_0^s du \int_0^u dt. \quad (15)$$

Б. Выбор аппроксимирующих функций. Собственная функция основного состояния водорода, если использовать единицы Хартри и не заботиться о нормировке, имеет простой вид e^{-r} . Поэтому представляется естественным положить в нулевом приближении для обоих электронов основного состояния гелия

$$e^{-r_1} e^{-r_2} = e^{-rs},$$

где z — эффективный заряд ядра, — следовательно, не совпадает с прежним Z и равняется для гелия $2 - \sigma$, где σ — постоянная экранирования. Мы исправим это нулевое приближение, добавив к нему в первом приближении члены, зависящие кроме s ещё и от координат t и u :

$$\psi = e^{-zs} (1 + C_1 u + C_2 t^2). \quad (16)$$

Здесь z , C_1 и C_2 суть три свободных параметра. То, что добавленную к нулевому приближению скобку мы считаем не зависящей от s , существенно для упрощения дальнейших вычислений; требования симметрии обусловили то, что зависимость от t мы написали квадратичной (см. выше). Мы могли бы, естественно, добавить в скобках и дальнейшие члены, прежде всего

$$C_3 u^2, C_4 u^3, C_5 t^4, \dots \quad (16a)$$

Тогда мы пришли бы к высшим приближениям, которые действительно были найдены Хиллераасом таким образом; мы удовольствуемся трёхпараметрическим приближением.

Чтобы достигнуть полного согласия с обозначениями Хиллерааса, перепишем чисто формально (16) в виде:

$$\psi = \varphi(ks, ku, kt), \quad \varphi = e^{-\frac{s}{2}} (1 + c_1 u + c_2 t^2). \quad (17)$$

Здесь мы также имеем три свободных параметра, именно: k , c_1 и c_2 . (17) совпадает с (16), если мы положим:

$$k = 2z, \quad c_1 = \frac{1}{k} C_1, \quad c_2 = \frac{1}{k^2} C_2. \quad (17a)$$

Форма (17) выбрана, в частности, потому, что для неё зависимость от s принимает простой для последующих интегрирований вид e^{-s} .

Определим сначала «масштабный множитель k », который превращает φ в ψ путём одновременного изменения масштабов всех трёх координат s , t , u и определяет одновременно упомянутую выше постоянную экранирования σ . Для этого заметим: правая часть (14) получит размерность k^{-6} , если мы введём новые переменные интегрирования ks , ku , kt и будем в соответствии с этим писать φ вместо ψ . Одновременно в правой части (13) первые три члена получат тогда размерность k^{-4} , а последний — размерность k^{-5} . Мы выразим это аналитически, если запишем вместо (13) и (14):

$$\left. \begin{aligned} \int H d\tau &= k^{-4}P + k^{-5}Q, \\ \int \psi^2 d\tau &= k^{-6}N, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

где P , Q и N — интегралы, образованные с помощью функции φ и не зависящие от k ¹⁾.

Если мы вычислим теперь отношение (5), то получим:

$$W = \frac{k^{-4}P + k^{-5}Q}{k^{-6}N} = \frac{k^2P + kQ}{N}. \quad (19)$$

¹⁾ Наши P , Q , N записываются в обозначениях Хиллерааса (см. сноску на стр. 567) как M , $-4L$ и $8N$, так как Хиллераас вычисляет в системе единиц, которые несколько отличаются от единиц Лартри.

Нам нужно так выбрать k , чтобы это отношение стало минимальным. Условием этого является

$$2kP + Q = 0, \quad k = -\frac{Q}{2P}, \quad (19a)$$

откуда, согласно (19), следует:

$$W = -\frac{Q^2}{4PN}. \quad (20)$$

Нам осталось ещё добиться выполнения условий минимума по двум остальным параметрам c_1 и c_2 :

$$\frac{\partial W}{\partial c_1} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial c_2} = 0.$$

Согласно (20) они дают ($c = c_1$ или c_2):

$$\frac{2}{Q} \frac{\partial Q}{\partial c} - \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial c} - \frac{1}{N} \frac{\partial N}{\partial c} = 0. \quad (21)$$

Итак, мы получаем два уравнения для определения c_1 и c_2 . После их решения аппроксимирующая функция φ будет определена с помощью полученного в (19a) значения k и ψ .

В. Вычисление интегралов N , Q , P . Интеграл N равен согласно (15), (14) и (17)

$$N = \int_0^{\infty} ds e^{-s} \int_0^s u du \int_0^u (s^2 - t^2)(1 + c_1 u + c_2 t^2)^2. \quad (22)$$

Вычисление интеграла по t приводит к результату

$$u(a + bu + cu^2 + du^3 + eu^4 + fu^5 + gu^6), \quad (22a)$$

который мы записали по степеням u , введя обозначения:

$$\begin{aligned} a &= s^2, & b &= 2c_1 s^2, & c &= \left(c_1^2 + \frac{2}{3}c_2\right)s^2 - \frac{1}{3}, \\ d &= \frac{2}{3}c_1(c_2 s^2 - 1), & e &= \frac{1}{5}c_2^2 s^2 - \frac{1}{3}c_1^2 - \frac{2}{5}c_2, \\ f &= -\frac{2}{5}c_1 c_2, & g &= -\frac{1}{7}c_2^2. \end{aligned}$$

Отсюда для значения интеграла по u , которое мы расположим теперь по степеням s , получится:

$$s^5 \left[\frac{4}{15} + \frac{7}{18}c_1 s + \frac{8}{105}(2c_1^2 + c_2)s^2 + \frac{11}{180}c_1 c_2 s^3 + \frac{4}{315}c_2^2 s^4 \right]. \quad (22b)$$

Наконец, осталось выполнить ещё интегрирование по s , что производится непосредственно с помощью известной формулы, выражающей результат интегрирования экспоненты, умноженной на степень в пределах от 0 до ∞ , через факториалы. Получаем:

$$N = 8(4 + 35c_1 + 48c_2 + 96c_1^2 + 576c_2^2 + 308c_1 c_2). \quad (22в)$$

Вычисление определённого в (18) интеграла Q протекает аналогичным образом. Используя последний член в (13), получаем для Q :

$$Q = \int_0^{\infty} ds e^{-s} \int_0^s du \int_0^u dt (s^2 - t^2 - 4Zsu)(1 + c_1 u + c_2 t^2)^2. \quad (23)$$

Интегрирование по t приводит к формально такому же выражению, как и (22а), однако с отчасти изменёнными значениями коэффициентов:

$$\left. \begin{aligned} a &= s^2, & b &= 2c_1s^3 - 4Zs, & c &= \left(c_1^2 + \frac{2}{3}c_2\right)s^3 - \frac{1}{3} - 8Zsc_1, \\ d &= \frac{2}{3}c_1(c_2s^3 - 1) - 4Zs\left(c_1^2 + \frac{2}{3}c_2\right), \\ e &= \frac{1}{5}c_2^2s^3 - \frac{1}{3}c_1^2 - \frac{2}{5}c_2 - \frac{8}{3}Zc_1c_2s, \\ f &= -\frac{2}{5}c_1c_2 - \frac{4}{5}Zsc_2^2, & g &= -\frac{1}{7}c_2^2. \end{aligned} \right\} \quad (23a)$$

Поэтому интегрирование по u приводит теперь, если расположить результат по степеням s , вместо (22б) к

$$s^4 \left\{ \frac{5}{12} - \frac{4}{3}Z + \left(\frac{8}{15} - 2Z\right)c_1s + \left(\frac{1}{10} - \frac{8}{15}Z\right)c_2s^2 + \right. \\ \left. + \left(\frac{7}{36} - \frac{4}{5}Z\right)c_1^2s^3 + \left(\frac{8}{105} - \frac{4}{9}Z\right)c_1c_2s^3 + \frac{1}{35}\left(\frac{13}{24} - 4Z\right)c_2^2s^4 \right\}. \quad (23б)$$

Интегрирование по s опять проводится сразу с помощью той же формулы и даёт:

$$-4 \left\{ 8Z - \frac{5}{2} + 4(15Z - 4)c_1 + 6(16Z - 3)c_2 + \right. \\ \left. + (144Z - 35)c_1^2 + 16(35Z - 6)c_1c_2 + 12(96Z - 13)c_2^2 \right\}, \quad (23в)$$

откуда для $Z = 2$ следует:

$$Q = -4 \left(\frac{27}{2} + 104c_1 + 174c_2 + 253c_1^2 + 1024c_1c_2 + 2148c_2^2 \right). \quad (23г)$$

Несколько кропотливее оказывается вычисление P , в процессе которого приходится рассматривать по отдельности члены, из которых состоит P . Мы сразу выпишем результат:

$$P = 8 \left(1 + \frac{25}{4}c_1 + 12c_2 + 16c_1^2 + 73c_1c_2 + 240c_2^2 \right). \quad (24)$$

Г. Определение параметров c_1 и c_2 и энергии W . Теперь в (21) знаменатели каждого отдельного члена квадратичны, а числители линейны в параметрах c_1 и c_2 . Освобождаясь от знаменателя, мы приходим к системе двух совместных уравнений пятой степени по c_1 и c_2 . Согласно Хиллераасу (см. примечание на стр. 567) приближённое решение этих уравнений будет:

$$c_1 = 0,08; \quad c_2 = 0,01. \quad (25)$$

С помощью этих значений из (22в), (23г) и (24) получается:

$$N = 8 \cdot 20,6; \quad Q = -4 \cdot 26,02; \quad P = 8 \cdot 1,80, \quad (26)$$

а из (20)

$$W = -2,90 \text{ (в единицах Хартри)}. \quad (27)$$

Так как согласно стр. 128 единица Хартри для энергии составляет $2R\hbar$, следовательно, равняется удвоенному значению потенциала ионизации водорода $27,1 \text{ эв}$, то из (27) следует:

$$W = -2,90 \cdot 27,1 = -78,5 \text{ эв}. \quad (28)$$

Энергия иона He^+ составляет $4R\hbar = -2 \cdot 27,1$ эв, поэтому для потенциала ионизации основного состояния атома гелия остаётся

$$J = (2,90 - 2,00) \cdot 27,1 = 24,4 \text{ эв.} \quad (29)$$

Это почти в точности совпадает с опытным значением

$$J = 24,5 \text{ эв.} \quad (30)$$

Представляет интерес также и численное значение «масштабного множителя» k . Из (19а) и (26) получается:

$$k = \frac{26,02}{7,20} = 3,64. \quad (31)$$

Поэтому согласно (17а) эффективный заряд ядра оказывается равным

$$z = \frac{k}{2} = 1,82 = 2 - 0,18,$$

так что 0,18 можно рассматривать как постоянную экранирования для заряда гелия 2. Для успеха метода Хиллерааса существенно, что постоянная экранирования очень легко нашлась при вариационном способе расчёта.

§ 2. ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ МЕТОДА ХИЛЛЕРААСА. ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ ИОН АТОМНОГО И ПОЛОЖИТЕЛЬНЫЙ ИОН МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА

Вариационный принцип (1.1) привёл бы к точному собственному значению W , если мы допустили бы к сравнению с нашей начальной функцией ψ все возможные вариации $\delta\psi$. Так как, однако, мы рассматривали в (1.16) или в (1.17) только трёхпараметрическое семейство и варьировали параметры внутри этого семейства, то мы смогли получить в (1.28) только приближённое значение W . Путём перехода к шестипараметрическому семейству (1.16а) Хиллераасу удалось почти удовлетворить спектроскопическим требованиям к точности, притом не только для основного состояния, но и для возбуждённых состояний гелия¹⁾.

Метод Хиллерааса основан на развитии Ритцем²⁾ общем приёме численного решения вариационных задач. Ритц вычисляет последовательные приближения к решению ψ в виде

$$\psi_n = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где φ_i образуют подходящим образом выбранную полную и по возможности ортогональную систему функций. Коэффициенты c_i получаются тогда алгебраическим путём из требования минимальности варьируемого интеграла. «Подходящий выбор» φ_i является при этом, как и в задаче гелия, условием, обеспечивающим быструю сходимость.

¹⁾ Получающиеся таким путём значения могут, естественно, быть только больше действительных значений энергии, так как расширение семейства функций сравнения может только уменьшить минимум интеграла. Предпринимались попытки ограничить с помощью аналогичных методов значения энергии и снизу. Ср., например, A. F. Stevenson a. M. F. Crawford, Phys. Rev. 54, 375 (1933); о более ранних русских работах см., например, Б. В. Ромберг, Sow. Phys. 8, 516 (1935); к последнему автору восходит также и приём, с помощью которого собственные функции и собственные значения находятся одновременно в ходе численного расчёта; см. ДАН СССР 14, 65 (1937) и Солок, Sow. Phys. 12, 120 (1937).

²⁾ W. Ritz, Crelles J. 135, 1 (1908), Собрание сочинений, Paris, 1911, стр. 192.

Вычисления предыдущего параграфа легко распространить с нейтрального гелия на изоэлектронную последовательность:

$$Z = \begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \dots \\ \text{H}^- & \text{He} & \text{Li}^+ & \text{Be}^{++} \dots \end{array}$$

Мы будем интересоваться первым членом этого ряда, существование которого твёрдо установлено химически в гидридах щелочных металлов:

$$\text{N}^+\text{H}^-, \text{K}^+\text{H}^-, \dots$$

Ион H^- обладает, как и нейтральный гелий, двумя электронами, которые, однако, связаны теперь значительно слабее, именно лишь зарядом протона $Z=1$. Следуя Бете ¹⁾, мы покажем, что, по крайней мере, основное состояние иона H^- является ещё стабильным, т. е. обладает энергией меньшей, чем для нейтрального атома водорода. В противном случае ион H^- мог бы спонтанно отдавать свой второй электрон и переходить в нейтральный атом водорода, что было бы несовместным с существованием гидридов щелочных металлов.

Если мы просмотрим вычисления § 1, то увидим, что в выборе координат и аппроксимирующих функций, равно как и в значениях N и P , не изменился ничего. Из-за нового значения $Z=1$ придётся лишь изменить значение Q . Именно из (1.23в) теперь получится:

$$Q = -4 \left(\frac{11}{2} + 44c_1 + 78c_2 + 109c_1^2 + 464c_1c_2 + 996c_2^2 \right). \quad (2)$$

Отсюда и из прежних выражений (1.24) и (1.22в) следует:

$$c_1 = 0,20, \quad c_2 = 0,05, \quad (3)$$

откуда с помощью (2), (1.22в) и (1.24) вычисляем:

$$Q = -4 \cdot 29,7, \quad N = 8 \cdot 21,7, \quad P = 8 \cdot 4,82. \quad (4)$$

Поэтому, согласно (1.20), энергия иона H^- будет равна

$$W = -0,525 \text{ (в единицах Хартри)} = -14,2 \text{ эв [ср. (1.28)]}. \quad (5)$$

Она оказывается меньше, чем энергия нейтрального атома водорода ($-13,55$ эв). Итак, последний действительно обладает некоторым, хотя бы и очень малым, сродством к электрону. То, чтобы у иона, кроме основного уровня, были бы стабильными ещё и возбуждённые, представляется сомнительным.

Для масштабного множителя получается, согласно (1.19а), численное значение

$$k = 1,535, \quad (6)$$

а для эффективного заряда ядра, согласно (1.17),

$$z = 0,767 = 1 - 0,233. \quad (6a)$$

Таким образом, постоянная экранирования $\sigma = 0,233$ оказывается несколько большей, чем в случае гелия.

Мы хотим ещё, хотя бы совсем схематически, остановиться на ионе *молекулы водорода* H_2^+ . При закреплённых ядрах этот ион приводит нас,

¹⁾ H. Bethe, Zs. f. Phys. 57, 815 (1929).

как и в случае задачи Кеплера, к одноэлектронной задаче, в которой переменные разделяются. Волновое уравнение, если мы обозначим, как и в гл. IX, § 3, оба ядра через a и b , расстояние между электроном и ядрами через r_a и r_b , а взаимное расстояние ядер через r_{ab} , гласит:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W' + \frac{e^2}{r_a} + \frac{e^2}{r_b} \right) \psi = 0, \quad W' = W - \frac{e^2}{r_{ab}}. \quad (7)$$

Ссылаясь на § 4 гл. IX, введём эллиптические координаты:

$$\xi = \operatorname{ch} u = \frac{r_a + r_b}{r_{ab}}, \quad \eta = \cos v = \frac{r_a - r_b}{r_{ab}}, \quad (8)$$

а в качестве третьей координаты — угол φ (ранее обозначавшийся через ω), отсчитываемый вокруг линии, соединяющей ядра. Учитывая левую часть (IX.4.22a), которую теперь надо поделить на

$$\sqrt{g_1 g_2 g_3} = \frac{1}{8} r_{ab}^3 \operatorname{sh} u \sin v (\operatorname{ch}^2 u - \cos^2 v),$$

получим из (7):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \\ + \frac{mr_{ab}^2}{2\hbar^2} \left(W' (\xi^2 - \eta^2) + \frac{4e^2}{r_{ab}} \xi \right) \psi = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Переменные в этом уравнении разделяются, если написать:

$$\psi = \psi_\xi \psi_\eta \psi_\varphi, \quad \psi_\varphi = e^{in\varphi}, \quad n — \text{целое}. \quad (10)$$

Для основного состояния $n = 0$, которым мы здесь ограничимся, для определения ψ_ξ и ψ_η получаются следующие уравнения:

$$\left\{ \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} + A - \gamma \xi^2 + 2\rho \xi \right\} \psi_\xi = 0, \quad (11)$$

$$\left\{ \frac{d}{d\eta} (\eta^2 - 1) \frac{d}{d\eta} + A - \gamma \eta^2 \right\} \psi_\eta = 0 \quad (12)$$

(A — параметр разделения), где введены обозначения:

$$\gamma = \frac{m}{2\hbar^2} r_{ab}^2 (-W') > 0, \quad \rho = \frac{me^2}{\hbar^2} r_{ab}. \quad (13)$$

ρ является, следовательно, расстоянием между ядрами в единицах Хартри ($m = e = \hbar = 1$).

Уравнения (11) и (12) не относятся (несмотря на их формальное сходство с дифференциальным уравнением для шаровых функций) к числу гипергеометрических дифференциальных уравнений, так как бесконечность является для них иррегулярной особой точкой. Граничными условиями являются: конечность в точках ± 1 , обращение ψ_ξ в нуль для $\xi \rightarrow \infty$. Ссылаясь относительно подробностей проведения интегрирования на работу Теллера¹⁾, мы запишем ψ_η в виде ряда²⁾ по возрастающим степеням η (этого оказы-

¹⁾ E. Teller, Zs. f. Phys. 61, 458 (1930), диссерт. Leipzig. Там же и критический обзор прежней литературы.

²⁾ Из аналитических соображений является естественным заменить степенной ряд (14) рядом по шаровым функциям, что подсказывается видом дифференциального уравнения (12). Это несколько упрощает рекуррентную формулу (17), которая остаётся, естественно, всё же трёхчленной. Ср. E. Hüller a.s., Zs. f. Phys. 71, 739 (1931).

вадается достаточно для основного состояния):

$$\psi_n = \sum a_n \eta^{2n} \quad (14)$$

и получим из (12), полагая равными нулю коэффициенты при η^0 и $\eta^{2\nu}$, рекуррентные формулы:

$$\begin{aligned} -2a_1 + a_0 A &= 0, \\ -(2\nu + 2)(2\nu + 1)a_{\nu+1} + [2\nu(2\nu + 1) + A]a_\nu - \gamma a_{\nu-1} &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Итак, рекуррентные формулы оказались трёхчленными и не приводят, поэтому (ср. дополнение 2) к элементарным функциям. Для отношений

$$b_\nu = \frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} \quad (15a)$$

из (15) получается:

$$b_0 = \frac{A}{2}, \quad (16)$$

$$-(2\nu + 2)(2\nu + 1)b_\nu + 2\nu(2\nu + 1) + A = \frac{\gamma}{b_{\nu-1}}. \quad (17)$$

Путём обращения (17) находим:

$$b_{\nu-1} = \frac{g_\nu}{1 + \alpha_\nu b_\nu}, \quad (18)$$

где

$$\left. \begin{aligned} g_\nu &= \frac{\gamma}{2\nu(2\nu + 1) + A}, \\ \alpha_\nu &= \frac{(2\nu + 1)(2\nu + 2)}{2\nu(2\nu + 1) + A}. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Заменяя в (18) ν на $\nu + 1$, $\nu + 2$, ... и внося в (18) получающиеся значения b_ν , $b_{\nu+1}$, ..., мы получим для b следующее представление в виде непрерывной дроби:

$$b_{\nu-1} = \frac{g_\nu}{1 + \alpha_\nu \frac{g_{\nu+1}}{1 + \alpha_{\nu+1} \frac{g_{\nu+2}}{1 + \dots}}} \quad (20)$$

сходимость которой можно усмотреть, как указал Теллер, из функционально-теоретических соображений. В частности, для $\nu = 1$, учитывая (16), находим:

$$\frac{A}{2} = \frac{g_1}{1 + \alpha_1 \frac{g_2}{1 + \alpha_2 \frac{g_3}{1 + \dots}}} \quad (21)$$

Это соотношение является трансцендентным уравнением, связывающим обе неизвестные нашей задачи: параметр разделения A и содержащееся в g_ν собственное значение энергии W или γ . Второе соотношение между A и W надо было бы получить из уравнения (11) для ψ_\pm и имеющих для него место граничных условий. Тогда путём исключения A наша задача о собственном значении была бы разрешена для основного состояния H_2^+ , сначала для произвольным образом выбранного расстояния ρ между ядрами; значение последнего следовало бы получить из требования минимума собственного значения. Для возбуждённых состояний (ср. работу Теллера) дело обстоит аналогично.

То, что мы столкнулись здесь с непрерывными дробями, соответствует общим замечаниям в конце дополнения 2. Рассмотрение по классической механике ведёт¹⁾ при этом, согласно тому же замечанию, к эллиптическим интегралам.

Для получения численных результатов эта общая схема не представляет, однако, большого удобства. Для этого оказывается гораздо более приспособленным вариационный метод, который использовался и в работе Теллера при получении уравнения для ψ_{ξ} . Особенно просто достигает цели Свартхольм²⁾ с помощью приёма, примыкающего к работе Хиллерааса, используя, кроме расстояния между атомами r_{ab} , лишь один свободный параметр. В результате было получено:

$$r_{ab} = 1,999a \quad (a \text{— радиус водорода}),$$

$$W = -1,205Rh = -16,32 \text{ эв.}$$

Они полностью совпадают с полученными другим методом результатам Хиллерааса (ср. примечание 2, стр. 576) и с результатами опыта.

Вопрос о том, следует ли ожидать появления многолинейчатых полос в спектре иона H_2^+ , обсуждался Стееншолтом³⁾.

§ 3. СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ТОМАСА⁴⁾ — ФЕРМИ⁵⁾

Рассмотрим атом со многими, скажем с Z , электронами. Так как рассмотрение системы большого, но конечного числа частиц является весьма трудным делом, то мы перейдём к бесконечно большому числу частиц, сохраняя при этом полный заряд неизменным. Мы хотим этим сказать, что мы представляем себе эти Z электронов размазанными и обусловленное ими распределение заряда ρ непрерывным. Для сферически симметричного поля ядра это распределение ρ будет сферически симметричным, т. е. оно будет зависеть лишь от расстояния r ядро \rightarrow точка наблюдения. То же самое должно выполняться и для вызванного этим распределением потенциала χ . Уравнение Пуассона, связывающее χ и ρ , запишется тогда в виде:

$$\Delta\chi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\chi) = -4\pi\rho. \quad (1)$$

Мы хотим включить в χ и потенциал, обусловленный зарядом ядра. Тогда в качестве одного граничного условия для χ мы получаем:

$$r\chi = Ze \quad \text{для} \quad r = 0. \quad (2)$$

Дальнейшие граничные условия относятся к «поверхности атома». Они станут более ясными, если мы рассмотрим сначала наряду с нейтральным атомом (Z электронов) и положительный ион ($Z - z$ электронов). Мы обозначим радиус атома в обоих случаях через R , хотя далее мы увидим, что для нейтрального атома $R = \infty$. Во внешнем пространстве $r > R$ мы напишем $\chi = \chi_a$ и, полагая как обычно потенциал равным нулю на бесконечно-

1) G. Y. Chao, Proc. Nat. Acad. (Washington) 15, 558 (1929) и M. Willstätter, Zs. f. Phys. 15, 873 (1931). Оба автора используют полуклассический метод ВКБ.

2) N. Svartholm, Zs. f. Phys. 111, 186 (1938).

3) G. Steensholt, Abhandl. Akad. d. Wiss. Oslo, № 4, 1936.

4) L. H. Thomas, Proc. Cambr. Phil. Soc. 23, 542, ноябрь 1926.

5) E. Fermi, Zs. f. Phys 48, 73, февраль 1928. Ср. также лейпцигские доклады 1928 г. (доклад Hirzel'я), в особенности таблицу на стр. 97.

сти, получим:

$$\chi_a = \frac{ze}{r}, \text{ следовательно, для нейтрального атома } \chi_a = 0. \quad (3)$$

Тогда на поверхности атома будут выполняться граничные условия:

$$\chi = \chi_a, \quad \frac{d\chi}{dr} = \frac{d\chi_a}{dr} \quad \text{для } r = R. \quad (4)$$

Последнее потому, что мы предполагаем поверхность свободной от поверхностных зарядов. В частности, для нейтрального атома граничные условия гласят, следовательно,

$$\chi = 0, \quad \frac{d\chi}{dr} = 0. \quad (4a)$$

Заметим, что второе из уравнений (4) заключает в себе как раз то утверждение, что содержащаяся в шаре радиуса $r = R$ алгебраическая сумма зарядов равна ze . В самом деле, согласно основным теоремам теории потенциала, эта сумма зарядов задаётся интегралом, взятым по ограничивающей шар сфере

$$-\frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \chi}{\partial n} d\sigma,$$

который будет, согласно (4) и (3), равен ze . В равной степени второе из уравнений (4a) обеспечивает нейтральность атома.

Мы будем рассматривать в дальнейшем в противоположность обычной теории потенциала наше непрерывное распределение заряда не как покоящееся, но как динамическое, и притом таким образом, что в каждом элементе объёма атома движение равновероятно распределено по всем направлениям, в то время как его интенсивность зависит только от положения элемента объёма, т. е. от r . Мы должны будем вернуться при этом к конечному заряду электрона e и к конечной массе m .

Мы запишем проходящую на один электрон энергию в виде

$$W = \frac{p^2}{2m} - e\chi \quad \text{для } r \leq R \quad (5)$$

(p — вектор импульса, $-e\chi$ — потенциальная энергия, так как χ означает потенциал, т. е. потенциальную энергию для заряда $+1$). С другой стороны, энергия некоторого мысленного, приведённого без скорости на поверхность атома, электрона составит:

$$W_a = -e\chi_a, \quad (5a)$$

где χ_a надо взять для $r = R$.

Мы хотим определить верхнюю границу P возможных импульсов из того требования, что для $p < P$ электрон остаётся в атоме, а для $p > P$ может его покинуть. Эта граница задаётся равенством $W = W_a$. Итак, из (5) и (5a) следует:

$$\frac{p^2}{2m} = e(\chi - \chi_a), \quad P = (2me(\chi - \chi_a))^{\frac{1}{2}}. \quad (6)$$

Итак, мы получаем в качестве объёма, доступного для концов векторов p , шар радиуса P , следовательно, шар объёма

$$\frac{4\pi}{3} P^3 = \frac{4\pi}{3} (2me(\chi - \chi_a))^{\frac{3}{2}}. \quad (7)$$

Представляя теперь себе этот шар заполненным концами выходящих из центра векторов p , мы получим представление упомянутой выше картины движения, равновероятного по всем направлениям, интенсивность которого зависит только от r .

Умножая это «импульсное пространство» (7) на элемент объёма координатного пространства, мы придём к шестимерному фазовому пространству тех электронов, которые образуют плотность ρ на расстоянии r от ядра. Мы разобьём этот объём на отдельные ячейки размера h^3 . Каждая ячейка задаёт определённое квантовое состояние; принцип Паули требует, чтобы при учёте спина каждому квантовому состоянию было бы отнесено не более двух электронов. Мы примем, что все фазовые ячейки содержат как раз это максимально возможное число электронов, и будем говорить, как и в квантовой статистике об этом случае как о случае полного вырождения. Умножая, следовательно, (7) на $\frac{2}{h^3}$, мы получим то число электронов, которое может быть помещено в наш импульсный шар согласно принципу Паули, и притом для элемента пространственного объёма. Если мы умножим ещё результат на заряд электрона — e , то получим электрический заряд в единице объёма, т. е. электрическую плотность ρ . Итак, мы имеем:

$$\rho = -\frac{8\pi e}{3h^3} [2me(\chi - \chi_a)]^{\frac{3}{2}}. \quad (8)$$

Подставляя это значение в дифференциальное уравнение (1), получим:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\gamma) = \frac{32\pi^2 e}{3h^3} [2me(\chi - \chi_a)]^{\frac{3}{2}}. \quad (9)$$

Это уравнение упрощается, если ввести в качестве новой зависимой переменной $r(\chi - \chi_a)$ [или пропорциональную ей величину φ , определённую в (12)]. Именно, так как χ_a означает здесь, так же как и в (5а), постоянное значение $\frac{ze}{R}$ на поверхности, то

$$\frac{d^2}{dr^2} r(\chi - \chi_a) = \frac{d^2}{dr^2} r\chi. \quad (10)$$

Заметим далее, что для $r=0$

$$r(\chi - \chi_a) = r\chi$$

и, согласно граничному условию (2),

$$\frac{1}{Ze} r(\chi - \chi_a) = 1. \quad (11)$$

Вводя ещё и новую независимую переменную (μ — постоянный множитель, который мы сейчас определим), положим:

$$x = \frac{r}{\mu}, \quad \varphi(x) = \frac{1}{Ze} r(\chi - \chi_a). \quad (12)$$

Тогда мы получаем согласно (11):

$$\varphi(0) = 0, \quad (13)$$

и из (9) и (10) получается дифференциальное уравнение Томаса — Ферми:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{x}}, \quad (14)$$

если для μ мы выберем значение (a — радиус атома водорода):

$$\mu = a \left(\frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (15)$$

Мы должны переписать теперь в новых переменных и наши граничные условия (4). Первое из них гласит, в силу (12), просто

$$\varphi(X) = 0, \quad X = \frac{R}{\mu}. \quad (16)$$

Во втором мы вычислим, что согласно (3)

$$\frac{d\chi_a}{dr} = -\frac{ze}{R^3} = -\frac{ze}{\mu^3 X^3} \quad (17a)$$

и в силу (12), учитывая (16),

$$\frac{d\chi}{dr} = \frac{Ze}{R} \left(\varphi'(x) \frac{dx}{dr} \right)_{x=X} = \frac{Ze}{\mu^2 X} \varphi'(X). \quad (17b)$$

Из приравнивания этих двух величин следует:

$$X\varphi'(X) = -\frac{z}{Z}. \quad (18)$$

Займёмся сначала нейтральным атомом с $z=0$. В этом случае из (16) и (18)

$$\varphi(X) = \varphi'(X) = 0. \quad (19)$$

Из (14) тогда следует не только $\varphi''(X) = 0$, но и при последовательном дифференцировании (14) $\varphi'''(X) = \varphi^{IV}(X) = \dots = 0$. Но это невозможно при конечном X , так как привело бы к $\varphi \equiv 0$. Мы должны заключить поэтому, что $X = \infty$. Радиус нейтрального атома в модели Томаса — Ферми бесконечно велик.

Поведение φ для $x \rightarrow \infty$ можно выяснить, если положить

$$\varphi = Ax^a. \quad (20)$$

Тогда из (14) следует:

$$Aa(a-1)x^{a-2} = A^{\frac{2}{3}} x^{\frac{3a-1}{2}}, \quad \text{следовательно,} \quad \begin{cases} a = -3, \\ A = 144. \end{cases} \quad (20a)$$

Ясно, что при таком асимптотическом поведении φ условия (19) могут быть выполнены для $X = \infty$ без того, чтобы φ обращалось, как для конечного X , тождественно в нуль. Ясно, что мы не можем непосредственно использовать решение (20), хотя оно и удовлетворяет (14) не только асимптотически, но и точно, так как оно становится сингулярным для $x=0$ и не удовлетворяет граничному условию (13). Однако можно убедиться¹⁾, что все обращающиеся на бесконечности в нуль решения дифференциального уравнения (16) ведут себя так, как частное решение (20), (20a). В их числе имеется одно, проходящее через точку $x=0$, $\varphi=1$, т. е. удовлетворяющее граничному условию (13). Это решение представлено на рис. 52 жирной кривой.

Приближённое решение, пригодное для очень больших x ($x > 12^{\frac{2}{3}}$), которое удовлетворяет и граничному условию $\varphi(0) = 1$, может быть записано

¹⁾ Проще всего с помощью предложенного автором способа: A. Sommerfeld, Rendic. Acad. dei Lincei, 15, 788 (1932); там выводится также и приближённое уравнение (21). Общее обсуждение дифференциального уравнения (21) было проведено уже Томасом (цит. выше) и продолжено автором: A. Sommerfeld, Zs. f. Phys. 78, 283 (1932).

в виде:

$$\varphi = \frac{144}{x^3} \left[1 + \left(\frac{12^{\frac{2}{3}}}{x} \right)^{\lambda} \right]^{\lambda_1}, \quad (21)$$

где λ и λ_1 — корни уравнения $\lambda^2 + 7\lambda = 6$, именно:

$$\lambda = \frac{-7 + \sqrt{73}}{2} = 0,772, \quad \lambda_1 = \frac{-7 - \sqrt{73}}{2} = -7,772. \quad (21a)$$

С другой стороны, для малых x имеет место разложение¹⁾:

$$\varphi = 1 + Cx + \frac{4}{3}x^{\frac{3}{2}} + \dots, \quad C = -1,589. \quad (22)$$

Однако приведённое значение C нельзя вывести из разложения вблизи нуля, но только благодаря использованию условия на бесконечности. Величина C определяет угол γ , под которым наша кривая пересекает ось φ на рис. 52:

$$\operatorname{tg} \gamma = \frac{1}{1,589}. \quad (22a)$$

Поведение кривой во всей области от 0 до ∞ было вычислено Ферми путём численного интегрирования (ср. стр. 578, примечание 5). Надёжное подтверждение вычислений Ферми было получено с помощью знаменитого интегратора Буша²⁾.

Кроме кривой для нейтрального атома на рис. 52 приведены другие кривые, проходящие через точку $x = 0$, $\varphi = 1$ и пересекающие ось φ частично под большими, частично под меньшими углами γ . Первые уходят в $\varphi = +\infty$ и представляют интерес только для атомов, находящихся под действием внешних сил (например, в кристаллической решётке). Напротив, последние кривые, которые пересекают ось x и уходят в $\varphi = -\infty$, представляют решения нашей задачи для различных степеней положительной ионизации.

Чтобы усмотреть это, нам достаточно истолковать геометрически налагаемые в случае иона условия (16) и (18). Уравнение (16) утверждает, что X представляет собой отрезок, отсекаемый кривой φ на оси абсцисс. (18) показывает, что касательная, проведённая к кривой $\varphi(x)$ в точке $(X, 0)$, отсекает на оси ординат отрезок $q = \frac{z}{Z}$. Следовательно, относящиеся к различным степеням ионизации кривые $\varphi(x)$ таковы, что эти отрезки имеют рациональные длины

$$q = \frac{1}{Z}, \frac{2}{Z}, \dots$$

¹⁾ E. V. Baker, Phys. Rev. 36, 630 (1930).

²⁾ V. Bush and S. H. Caldwell, Phys. Rev. 38, 1898 (1931).

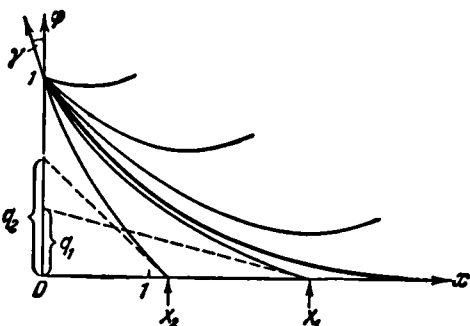


Рис. 52. Кривые Томаса — Ферми для нейтрального атома (жирная кривая) и для ионов двух различных степеней ионизации (из которых кривая X_1 , q_1 отвечает меньшей, а X_2 , q_2 большей степени ионизации). Верхние кривые относятся к атомам, находящимся под внешним воздействием.

Эта касательная расположена, естественно, тем ближе к оси абсцисс, чем меньше ступень ионизации z , и переходит для $z=0$, т. е. для нейтрального атома, в саму ось абсцисс. То, что радиус иона R или пропорциональный ему отрезок X уменьшается с ростом ступени ионизации, происходит, конечно, потому, что избыток заряда ядра тем сильнее стягивает электронное облако, чем он больше. То, что этого не происходит для нейтрального атома и что в этом случае электронное облако размазывается до бесконечности, представляет собой недостаток нашей модели, к которому мы вернёмся в § 5. Вблизи ядра, где действует притяжение от полного заряда ядра, мы получаем и для нейтрального атома возрастающую плотность электронов. Это распределение электронов можно сравнить с распределением плотности воздуха по барометрической формуле; общим является в обоих случаях распространение до бесконечности.

§ 4. ПРИМЕНЕНИЕ К ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

Ферми развил уже в своём первом сообщении о статистической теории атома в высшей степени смелое и интересное применение этой теории к построению периодической системы. Рассматривается вопрос о том, для какого Z впервые появляются «типы орбит» с заданным значением квантового числа l . Мы будем характеризовать эти типы орбит, как и в прежней квантовой теории, значением момента

$$M = [rp] = rs, \quad (1)$$

где s означает составляющую импульса, перпендикулярную к r . Сколько имеется в статистической модели электронов, моменты которых заключены между M и $M + dM$? Рассмотрим сначала некоторый определённый элемент объёма на расстоянии r от ядра и представим на рис. 53 введённую уравнением (3.6) сферу (Ферми-сферу) радиуса P . Направление r выделяет внутри этого шара определённую

ось A . Для любой точки Q шара вектор \vec{OQ} совпадает по величине и направлению с импульсом p . Мы разложим его на две составляющие, параллельную выделенной оси A и перпендикулярную к ней. Последнюю составляющую мы обозначим через s . Согласно (1) величинам M и $M + dM$ соответствуют расстояния

$$s = \frac{M}{r} \quad \text{и} \quad s + ds = \frac{M + dM}{r}.$$

Они ограничивают на рис. 53 цилиндрический слой внутреннего радиуса s и толщины ds с осью A . Его высота, измеренная по внутренней границе, составляет:

$$H = 2\sqrt{P^2 - s^2},$$

следовательно, полный объём

$$2\pi s H ds = 4\pi \sqrt{P^2 - \frac{M^2}{r^2}} \cdot \frac{M dM}{r^2}. \quad (2)$$

Умножая его на $\frac{2}{h^3}$, мы получим, согласно замечанию на стр. 580, число электронов, момент которых лежит между M и $M + dM$ для определённого элемента объёма координатного пространства и определённого

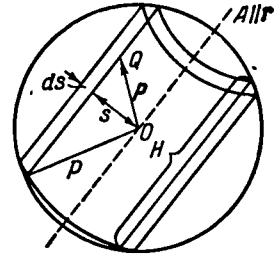


Рис. 53. Построение внутри Ферми-сферы радиуса P для определения числа электронов с моментами между M и $M + dM$.

направления оси A . Если умножить теперь это число ещё на объём сферического слоя координатного пространства $4\pi r^2 dr$ и проинтегрировать по r , то мы придём к полному числу электронов в атоме, момент которых заключён в интервале от M до $M + dM_0$. Это число мы назовём dN_M :

$$dN_M = \frac{32\pi^2}{h^3} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{P^2 - \frac{M^2}{r^2}} dr \cdot M dM. \quad (3)$$

Пределы интегрирования r_0 и r_1 надлежит выбрать здесь таким образом, чтобы между ними квадратный корень (высота нашего цилиндрического слоя H) был бы действителен.

Напишем для M :

$$M = \frac{h}{2\pi} \left(l + \frac{1}{2} \right). \quad (4)$$

Это — обычный компромисс между старым и волномеханическим определением азимутального квантового числа. Соответственно мы напишем для dM :

$$dM = \frac{h}{2\pi} dl, \quad \text{где } dl = 1,$$

так как мы интересуемся лишь целочисленными разностями квантового числа. Соответствующее значение числа электронов мы назовём N_l . Подставим для P его значение (3.6) с $\chi_a = 0$ (нейтральный атом). Тогда из (3) получится:

$$N_l = \frac{8}{h} \left(l + \frac{1}{2} \right) \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2me\chi - \hbar^2 \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{r^2}} dr.$$

Наконец, перейдём с помощью (3.12) от χ , r к φ , x и найдём:

$$\left. \begin{aligned} N_l &= B \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{x\varphi - A} \frac{dx}{x}, \\ A &= \left(\frac{4}{3\pi Z} \right)^{\frac{2}{3}} \left(l + \frac{1}{2} \right)^2, \quad B = \left(\frac{48Z}{\pi^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(l + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Смысл пределов интегрирования x_0 , x_1 показан на рис. 54. Мы нанесли на этот рисунок пунктирную кривую $\varphi(x)$ и сплошную кривую $x\varphi(x)$, исходя из вычисленной Ферми таблицы для φ , и параллельную оси абсцисс прямую на переменном расстоянии A , причём мы предполагаем, что в выражении (5) для A квантовое число l остаётся постоянным, а Z растёт, начиная с нуля. Тогда наша параллель A будет опускаться из бесконечности и для определённого значения Z коснётся вершины сплошной кривой. В этом случае мы получим $x_0 = x_1$, т. е. область интегрирования, равную нулю. По мере дальнейшего уменьшения A область интегрирования станет конечной, точками x_0 и x_1 будут точки пересечения A с кривой $x\varphi(x)$.

В вершине кривой согласно таблицам

$$x\varphi = 0,488.$$

Итак, согласно сказанному, $N_l = 0$ для $A = 0,488$ и переходит затем к положительным значениям. Следовательно, здесь расположена граница для первого появления орбит типа l . Уравнение (5) даёт для этой границы:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{4}{3\pi Z}\right)^{\frac{2}{3}} \left(l + \frac{1}{2}\right)^3 &= 0,488, \\ Z &= \frac{4 \left(l + \frac{1}{2}\right)^3}{3\pi \cdot 0,488^{\frac{3}{2}}} = 1,24 \left(l + \frac{1}{2}\right)^3. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Вычислим это выражение для $l = 0, 1, 2, 3$ и определим тем самым первое появление s -, p -, d -, f -орбит в основных состояниях элементов периодической системы. Первая строка следующей таблицы даёт вычисленное из (6) нецелое значение Z , вторая — ближайшее большее целое значение Z . Но и это значение означает только нижний предел для появления рассматриваемых типов орбит, так как нельзя ручаться за то, что число N_l , которое равнолось для нецелого Z нулю, сразу станет для увеличенного целого Z большим или равным 1. Ферми определил путём численного вычисления интеграла (5) те значения Z , для которых N_l достигает значения 1. Эти найденные Ферми значения стоят в третьей строке таблицы. Как мы

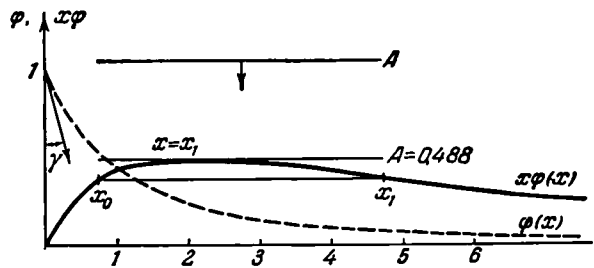


Рис. 54. Первое появление в периодической системе некоторого значения квантового числа l . Прямая A сдвигается вниз до тех пор, пока она не коснется кривой $x\varphi(x)$.

видим, наше более простое вычисление, не требующее новых численных интегрирований, приводит к результатам, очень близким к полученным Ферми. В последней строке приведены значения Z , для которых действительно реализуется рассматриваемый тип орбиты в периодической системе, и названия соответствующих элементов.

l	s	p	d	f
	0	1	2	3
Уравнение (6)	0,15	4,2	19,4	53,2
Ферми	1	5	20	54
Периодическая система	1	5	21	55
	H	B	Sc	Ce

Совпадение с действительностью получается поразительно хорошим. В частности, в нашей таблице, несмотря на грубость статистической модели, нашло своё выражение то обстоятельство, что построение $3d$ -орбит не начинается, как то можно было бы ожидать, для $Z = 19$, т. е. непосредственно вслед за аргоном, но сначала заполняются $4s$ -орбиты (у K и Ca $Z = 19$ и 20); в равной степени построение $4f$ -орбит, которого можно было бы ожидать непосредственно после палладия, т. е. при $Z = 47$, откладывается из-за заполнения $5s$ -, $5p$ - и $6s$ -орбит.

§ 5. ДАЛЬНЕЙШИЕ ПРИМЕНЕНИЯ И ДОПОЛНЕНИЯ

Статистическая модель была применена с большим успехом Ферми к вычислению поправки Ридберга для s -термов¹⁾, Разетти для вычисления рентгеновских M -уровней²⁾, Джентилем и Майорана к рентгеновским дублетам³⁾. В этих случаях речь идёт о *внутренних* особенностях атома (s -термы, особенно имеющие большие квантовые числа, соответствуют проникающим орбитам). Наоборот, модель не выдерживает испытания в применении к *внешним* особенностям атома. Примером может служить диамагнетизм, для которого внешние части атома играют основную роль, соответственно его выражению (II.6.23) через электрический момент инерции; в цитированной в примечании на стр. 581 работе автора показано, что для нейтрального атома получаются примерно в десять раз большие значения, для ионов первой и второй степени ионизации расхождения становятся на порядок меньшими. То же самое справедливо и в отношении *потенциалов ионизации*⁴⁾. Для нейтрального атома они оказываются много меньшими действительных значений, для однократных ионов они примерно совпадают с наименьшими для рассматриваемого периода (именно, с потенциалами ионизации щёлочноподобных ионов Mg^+ , Ca^+ , ...) и превосходят их лишь для двукратных ионов. Естественно, что модель не может дать ничего касательно сильного изменения потенциалов ионизации внутри каждого отдельного периода периодической системы. Другим примером, когда модель отказывается служить, может быть форма комптоновской линии на рис. 45 (стр. 519), кривая IV, которая получается слишком узкой, так как согласно нашей модели нейтральный атом простирается вплоть до бесконечности, где его электроны связаны сколь угодно слабо.

Бесконечный радиус нейтрального атома явно связан со следующим обстоятельством. Если бы мы «распылили», как в модели Томаса — Ферми, свободные электроны в металле, то работа выхода сделалась бы равной нулю и вне металла возникла бы электронная атмосфера, которая и в этом случае простиралась бы вплоть до бесконечности. Именно работа выхода задаётся по порядку величины энергией изображения $\frac{e^2}{r_g}$ Шоттки, где r_g — расстояние между соседними ионами металла в решётке. Но эта энергия исчисляется при $e \rightarrow 0$.

Если, таким образом, и нейтральный атом не может сохранить в модели Томаса — Ферми свойства своих внешних электронов, то представление *отрицательных ионов* с помощью этой модели оказывается уже полностью невозможным⁵⁾.

1) E. Fermi, Zs. f. Phys. 49, 550 (1928); дальнейшие численные результаты относительно s -термов с большими квантовыми числами приводят Fermi и E. Amaldi, R. Acc. d' Italia 6, 119 (1934).

2) F. Rasetti, Zs. f. Phys. 49, 546 (1928).

3) G. Gentile и E. Majorana, Acc. del. Lincei 8, 229 (1928).

4) A. Sommerfeld, Zs. f. Phys. 80, 415 (1933). В улучшенном учётом «обмена» методе Хюльтена [см. L. Hulthen, там же 95, 789 (1935) и H. Jensen, там же 101, 141 (1936), рис. 2], напротив, вычисленные значения совпадают достаточно хорошо со средним ходом опытных значений уже для однократных ионов, а также для ионных восприимчивостей [ср. Jensen, Meyer-Gossler и Rohde, там же 110, 277 (1938), рис. 2].

5) Посредством не совсем свободной от произвола поправки, заключающейся в исключении «обратного действия электрона на самого себя», которое будет сейчас обсуждаться, Ферми и Амальди удалось ввести в теорию и отрицательные ионы. См. Fermi и Amaldi, Acc. del. Lincei 6, 119 (1934).

Основная ошибка, возникающая при «распылении» атомных электронов, состоит в следующем: если мы проводим вычисления с дискретными электронами, то электростатическая энергия будет равна

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum'_{i,k} \frac{e_i e_k}{r_{ik}}, \quad (1)$$

где мы ради общности обозначили заряды через e_i, e_k . Штрих у знака суммы означает здесь, что мы не вправе включить в сумму члены с $i = k$, отвечающие «собственной энергии». Если же мы проводим вычисления не с дискретными зарядами e_i, e_k , но с непрерывным распределением зарядов $\rho_i(P) d\tau_P, \rho_k(Q) d\tau_Q$, то на месте r_{ik} выступает r_{PQ} , а на месте (1)

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum'_{i,k} \int \int \frac{\rho_i(P) \rho_k(Q)}{r_{PQ}} d\tau_P d\tau_Q. \quad (2)$$

Однако в случае распределения Томаса — Ферми мы знаем не относящееся к каждому отдельному электрону распределение плотности ρ_i, ρ_k , но только суммарную плотность ρ . Мы не знаем, следовательно, как нужно провести обозначенное штрихом исключение членов с $i = k$. Если же с другой стороны, вообще опустить штрих, то мы учтём для каждого электрона обратное действие заряда самого на себя. Но это, конечно, столь же недопустимо при подсчёте с непрерывным распределением, как это было при дискретном распределении в (1).

Вопрос состоит, следовательно, в том, каким образом можно выключить это самодействие без слишком большого произвола и притом так, чтобы сохранить всё же преимущества вычислений с непрерывным распределением. Путь к этому был указан Дираком ¹⁾, когда он, следуя Фоку ²⁾, учёл в теории Томаса — Ферми обменный эффект.

Чтобы постигнуть смысл этого приёма, вспомним, что (2) не представляет собой полного волновомеханического выражения для энергии, даже если бы мы подставили туда вместо ρ_i и ρ_k их волновомеханические определения через собственные функции l -го и k -го состояний. Наоборот, согласно (IX.2.16), на месте (2) должно было бы выступать выражение

$$E_{el} = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{12} = e^2(C - A). \quad (3)$$

Выбранный здесь отрицательный знак ε_{12} соответствует, согласно стр. 530, ортотермам гелия (антисимметричные собственные функции, параллельные спины). C и A означают кулоновский и обменный интегралы. В определяющих их уравнениях (IX.2.22, 23) мы заменим для наших целей номера электронов 1 и 2 обозначениями точек P и Q , а номера состояний l и n индексами i и k , по которым производится суммирование, исключая значения $l = k$ и добавляя множитель $\frac{1}{2}$. Тогда (3) перейдёт в

$$E_{el} = \frac{e^2}{2} \left(\sum'_{i,k} \int \int \frac{d\tau_P d\tau_Q}{r_{PQ}} \psi_i^*(P) \psi_i(P) \psi_k^*(Q) \psi_k(Q) - \sum'_{i,k} \int \int \frac{d\tau_P d\tau_Q}{r_{PQ}} \psi_i^*(P) \psi_k(P) \psi_i(Q) \psi_k^*(Q) \right). \quad (4)$$

¹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. 26, 376 (1930).

²⁾ V. Fock, Zs. f. Phys. 61, 126 (1933).

Первый член этого выражения совпадает, как то и должно было быть, с кулоновской энергией из (2), так как

$$p_i(P) = e\psi_i^*(P)\psi_i(P), \quad p_k(Q) = e\psi_k^*(Q)\psi_k(Q).$$

Второй член как обменный интеграл включает не обыкновенные плотности p_i, p_k , но смешанные плотности p_{ik}, p_{ki} .

Существенно, что если мы вычисляем разность обоих членов, то мы можем включить в суммирование и состояния с $l = k$, так как в (4) они в точности сократятся. Следовательно, штрих можно просто опустить. Тем самым мы устанавливаем, что требуемый волновой механикой учёт обменного взаимодействия освобождает нас от необходимости вычитать обратное действие электронов самих на себя¹⁾.

Блох²⁾ показал, что после такого упрощения оказывается возможным вычислить обменный член; именно выразить его через суммарную плотность ρ электронного состояния, если заменить, что соответствует духу метода Томаса — Ферми, собственные функции ψ плоскими волнами. Тем самым оказывается возможным добавить к потенциальной электростатической энергии атома подходящую «обменную энергию» и изучать равновесие «атома Томаса — Ферми с обменом».

Мы не будем развивать эту идею дальше, особенно учитывая то, что наш элементарный метод § 3 не был бы для этого достаточным и его необходимо было бы заменить вариационным методом.

Обменная энергия проявляется в том, что крепче связывает атом. В частности, она придаёт конечное значение радиусу нейтрального атома. Это показали почти одновременно и независимо друг от друга Бриллюэн³⁾ и Иенсен⁴⁾.

В принципе метод Томаса — Ферми можно перенести с атома на многоцентровые задачи о строении молекул. Так как, однако, при этом пропадает использовавшаяся нами симметрия, то точное рассмотрение возникающих в этом случае дифференциальных уравнений типа (3.14) встречается с непреодолимыми трудностями. Хунд⁵⁾ показал для простейших случаев, как можно приближённо подойти к подобным задачам.

Благоприятнее складываются обстоятельства для переноса этого метода на кристаллические решетки, так как здесь, по крайней мере для решёток простейшей кубической симметрии, расположение соседних ионов приводит к приближённой сферической симметрии⁶⁾. Мы сошлемся в части общего обсуждения проблемы на Ленца⁷⁾, в части рассмотрения конкретных случаев — на Иенсена⁸⁾.

Дифференциальное уравнение типа Томаса — Ферми уже давно встречалось в астрофизике под именем дифференциального уравнения Эмдена⁹⁾

1) H. Jensen, Zs. f. Phys. 101, 141 (1936); ср. в особенности сноску 4 на стр. 141.

2) F. Bloch, там же 57, 545 (1929). Здесь идет речь о сумме трех уравнений (11) для $n = 0$.

3) L. Brillouin, L'atome de Thomas — Fermi (Атом Томаса — Ферми), Actualités Scientif. et Industr. 160, Париж, 1934, стр. 30.

4) H. Jensen, Zs. f. Phys. 89, 713 (1934); 93, 232 (1935); 101, 141 (1936).

5) F. Hund, Zs. f. Phys. 77, 12 (1932).

6) E. Wigner a. F. Seitz, Phys. Rev. 43, 804 (1933).

7) W. Lenz, Zs. f. Phys. 77, 713 (1932).

8) H. Jensen, там же 77, 722 (1932) и 101, 164 (1936); ср. также примыкающие работы T. Neugebauer u. P. Gombás, там же 89, 480 (1934) и P. Gombás, там же 92, 796 (1934); 91, 378 (1935).

9) R. Emden, Theorie der Gaskugeln, Leipzig, Teubner, 1907 (Р. Эмден, Теория газовых шаров, Лейпциг, Тейбнер, 1907).

и было исследовано численными способами:

$$\varphi'' = -\frac{\varphi^n}{x^{n-1}}. \quad (5)$$

Для $n = \frac{2}{3}$ оно, если отвлечься от знака, переходит в (3.14). Этот обратный знак происходит за счёт того, что в астрофизике речь идёт о гравитационном потенциале и что, согласно закону Ньютона, массы притягиваются, в то время как заряды одного знака отталкиваются. При этом связь между давлением p и плотностью ρ записывалась в форме «политропы»:

$$p = a_1 \rho^k. \quad (6)$$

Здесь k находится в нашем распоряжении; в частном случае адиабатического равновесия $k = \frac{c_p}{c_v}$. Световым давлением в первоначальной теории Эмдена пренебрегалось. Связь между k и входящим в (5) показателем n задаётся соотношением

$$n = \frac{1}{k-1}. \quad (7)$$

Особому случаю $n = \frac{2}{3}$ отвечает $k = \frac{5}{3}$, т. е. адиабата одноатомного газа.

Другое отличие между уравнениями Томаса — Ферми и Эмдена заключено в граничных условиях. В нашей атомной задаче граничные условия налагались в точках $x = 0$ и $x = \infty$ (или в случае иона в точках $x = 0$ и $x = X$). В проблеме же газового шара мы сталкиваемся с простейшим случаем, когда оба граничных условия относятся к точке $x = 0$, т. е. к центру шара.

Из числа бесчисленных новых работ относительно уравнения Эмдена особого упоминания заслуживает всестороннее обсуждение Фаулера ¹⁾.

§ 6. МЕТОД «САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ» ХАРТРИ

В предыдущем изложении мы часто пользовались представлением о сглаженном центрально-симметричном поле $V(r)$, которое объединяет действие на некоторый рассматриваемый электрон ядра и остальных электронов (ср., например, гл. II, § 10). В 1927 г. Хартри ²⁾ поставил перед собой задачу вычислить это поле. Он назвал его «самосогласованным полем».

Мы ограничим наше рассмотрение первым использованным Хартри примером — ионом Rb^+ , $Z = 37$. У этого иона K -, L - и M -оболочки полностью заполнены, а в N -оболочке имеется замкнутая группа из восьми электронов. Числа заполнения, обозначения термов и квантовые числа выглядят так, как указано в таблице на стр. 590.

В качестве нулевого приближения Хартри принял получающееся из модели Томаса — Ферми распределение этих 36 электронов; их плотность ρ и их потенциальная энергия V_0 центрально-симметричны, полностью сглажены и не дают возможности сказать что-либо относительно распределения по оболочкам. Это нулевое приближение должно затем исправляться шаг за шагом. Рассмотрим для этого одну из содержащихся в таблице электронных

¹⁾ R. H. Fowler, Monthly Notices 81, 63 (1930).

²⁾ D. R. Hartree, Wave mechanics of an atom with a Non-Coulomb Central Field, Proc. Camb. Phil. Soc. 24, 89 (1 часть); 111 (II часть) (1928). [Метод был развит Фоком (см. Кондон — Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 194), стр. 416]. (Прим. ред.)].

групп, скажем k -ю. Для отдельного её электрона выполняется уравнение Шрёдингера. Мы будем интересоваться только радиальной частью R соб-

	K	L		M			N	
	2	2	6	2	6	10	2	6
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p
n	1	2	2	3	3	3	4	4
l	0	0	1	0	1	2	0	1
n_r	0	1	0	2	1	0	3	2

ственной функции и положим $rR = P$. Согласно (II.10.3) для P , если пользоваться единицами Хартри, имеет место уравнение

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + \left\{ 2(W - V) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} P = 0. \quad (1)$$

Мы подставим для V (при условии внесения ещё одной поправки, которую мы введём позже) поле $V = V_0$ нулевого приближения и проинтегрируем уравнение численно таким образом, чтобы, во-первых, получаемое решение имело между $r = 0$ и $r = \infty$ как раз n_r нулей и, во-вторых, удовлетворяло граничным условиям $P = 0$ для $r = 0$ и для $r = \infty$. (Требование конечности R при $r = 0$ приводит при переходе к $P = rR$ к требованию обращения в нуль.) Одновременное выполнение обоих условий возможно только для определённого

значения W . Вместе с W определяется и P . $P^2 dr$ задаёт заряд, содержащийся в сферическом слое между r и $r + dr$, если выполняется условие нормировки:

$$\int_0^{\infty} R^2 r^2 dr = \int P^2 dr = 1. \quad (2)$$

Тем самым мы нашли вклад одного из электронов нашего k -го слоя в полную плотность электронов; умножая этот вклад на соответствующее число заполнения (2 для s -термов, 6 для p -термов), мы получаем вклад всей k -й оболочки. Вычисления приходится проводить в отдельности для каждой

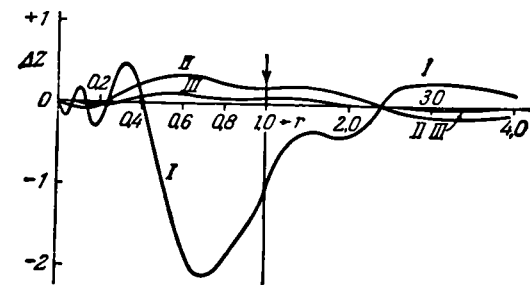


Рис. 55. Последовательные приближения при получении «самосогласованного поля» для Rb^+ (фиг. 1 цитированной работы Хартри). Абсциссы: расстояние r от ядра в единицах Хартри. В обозначенной стрелкой точке $r = 1$ меняется масштаб. Ординаты: разности между плотностями зарядов последовательных пар приближений, измеряемые разностями ΔZ эффективных зарядов Z для данного расстояния r .

оболочки. Сумма всех полученных таким образом распределений даёт нам распределение плотности в первом приближении ρ_1 , причём $\rho_1 dr$ означает содержащийся в сферическом слое между r и $r + dr$ заряд. Это распределение первого приближения отличается, естественно, от распределения нулевого приближения. Разность обоих изображена на рис. 55 кривой I . В то время как распределение нулевого приближения монотонно убывало от $r = 0$ к $r = \infty$, распределение первого приближения, а потому и разностная кривая I , обна-

рживает колебания, отвечающие отдельным оболочкам и подоболочкам. Из распределения плотности в первом приближении вычисляется силовое поле V_1 в первом приближении. Далее оно подставляется вместо V в уравнение (1) и для электрона k -й оболочки опять вычисляются W , P и P^2 . Суммирование с учётом чисел заполнения приводит к второму приближению распределения плотности ρ_2 , которое исправляет распределение первого приближения. Разность обоих распределений изображена на рис. 55 кривой II. Её ординаты уже существенно меньше ординат кривой I.

Из ρ_2 вычисляется поле во втором приближении, подстановка которого в (1) приводит к распределению плотности в третьем приближении ρ_3 . Разность $\rho_3 - \rho_2$ изображена на рис. 55 кривой III. Она проходит уже столь близко к оси абсцисс, что дальнейшие вычисления можно на этом прекратить. Действительно, вычисленное из ρ_3 поле V_3 было бы почти равным полю V_2 . Мы можем рассмагивать, следовательно, это поле $V_2 \sim V_3$ как самосогласованное, так как оно воспроизводит себя с помощью изложенного здесь волномеханического формализма.

То же самое можно сказать и о собственных значениях W , которые получаются в конце этого процесса из уравнений Шредингера для отдельных термов (n, l). Эти собственные значения представляют, очевидно, рентгеновские термы рассматриваемых подоболочек и хорошо совпадают, как показал Хартри, с опытными значениями для Rb.

Количество содержащихся в таком процессе отдельных шагов и объём необходимой вычислительной работы возрастают, естественно, вместе со сложностью атома. В то время как для рутидия оказалось достаточным трёх шагов, причём каждый шаг был связан с численным интегрированием восьми уравнений Шредингера, для атома ртути требуется по меньшей мере девять шагов, причём оказывается большим соответственно более сложной оболочечной структуре, и число уравнений Шредингера, которые приходится интегрировать каждый раз, именно это число возрастает до 14.

Приведённое выше описание процесса последовательных приближений было, однако, ещё не полным в одном пункте. Поля V_0, V_1, V_2, \dots объединяют действие *всех* электронов; но ведь при решении уравнения (1) для определённого электрона некоторой оболочки мы должны вычесть поле, вызываемое как раз этим электроном. Положение вещей здесь такое же, как и для уравнений (5.1), (5.2). Первоначально Хартри использовал для вычитания приём, аналогичный описанному в примечании 5 на стр. 586. Позднее ¹⁾ он обратился к основанному на обменном эффекте и развитому В. Фоком (ср. примечание 2 на стр. 587) методу, последовательному с теоретической точки зрения и приводящему к удовлетворительным численным результатам.

Хартри, в последние годы совместно с В. Хартри, распространил свой метод на большое число атомов: He, Cl⁻, Cu⁺, O, K, Cs, Be, Ca, Hg, F⁻, Al⁺⁺⁺, Ag и т. д. Вычисления проведены с большим знанием дела; ещё не опубликованные результаты принесут много пользы всем интересующимся. Повторение вычислений ²⁾ для Rb⁺ подтвердило прежние результаты 1927 г. в пределах указанных тогда ошибок. В дальнейшем оказалось возможным прибегнуть ³⁾ к помощи интегратора Буша (см. стр. 582), что обещает ускорение вычислений.

Сколь точно можно вычислить форму комптоновской линии неона, исходя из хартриевской собственной функции, мы видели на рис. 45 на стр. 519.

¹⁾ Ср., например, Proc. Roy. Soc. 154, 156, 157.

²⁾ Proc. Roy. Soc., 151, 104 (1935).

³⁾ Phys. Rev. 46, 738 (1934).

Диаманитная восприимчивость, для которой оказался непригодным прежний метод Томаса — Ферми (ср. стр. 586), также хорошо совпадает с опытом для Ag и K^+ ¹⁾, для чего оказывается существенным учёт обменного эффекта. Естественно, что «самосогласованное поле» служит наилучшим образом и при вычислении вероятностей переходов ²⁾. Резюмируя, можно сказать, что благодаря многолетней и целеустремлённой работе Хартри практически разрешена задача интегрирования уравнения Шредингера даже для тяжёлых атомов (Hg!).

§ 7. МЕТОД ВЕНТЦЕЛЯ — КРАМЕРСА — БРИЛЛУЭНА

Вентцель ³⁾ и Бриллиуэн ⁴⁾ придумали теоретически поучительный и практически плодотворный метод приближения волномеханических решений к классическим. Вскоре после этого Крамерс ⁵⁾ освободил этот метод от некоторых первоначально присущих ему математических пороков. Поэтому название ВБК было бы для этого метода, пожалуй, правильнее, чем ставшее, в особенности в Америке, обычным название ВКБ ⁶⁾.

Напомним начало этой книги и положим, как и в (1.1.6а),

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar} \int y dx}. \quad (1)$$

Мы написали здесь $\int y dx$ вместо прежнего S , т. е. ограничиваемся одномерной задачей. Интеграл мы будем считать неопределённым с закреплённым нижним пределом x_0 и переменным верхним пределом x .

Одномерное волновое уравнение имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi = 0;$$

для дальнейшего его можно записать в более простом виде:

$$\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + p^2 \psi = 0, \quad (2)$$

где «импульс» p определяется классическим соотношением

$$p = \sqrt{2m(W - V)}. \quad (3)$$

Дифференциальное уравнение для ψ является уравнением второго порядка и первой степени. Образует теперь из (1)

$$\hbar \psi' = iy\psi, \quad \hbar \psi'' = (i\hbar y' - y) \psi.$$

Тогда из (2) получится:

$$\frac{\hbar}{i} y' = p^2 - y^2. \quad (4)$$

Мы получили связанное с (2) «уравнение Риккати».

1) Proc. Roy. Soc. 166, 462 (1938).

2) Там же 16^a, 182 (1938).

3) G. Wentzel, Zs. f. Phys. 38, 518 (1926). Кроме задачи Кеплера Вентцель рассматривает в этой работе с особенной простотой эффект Штарка второго порядка.

4) L. Brillouin, C. R., июль 1926.

5) H. A. Kramers, Zs. f. Phys. 39, 828 (1926); ср. также A. Zwaan, Diss. Utrecht, 1929 и Arch. Néerl. 12, 33 (1929).

6) Английские авторы причисляют также и Джеффрейса [H. Jeffreys, Proc. London Math. Soc. 23, 437 (1924)] к авторам ВКБ-метода.

Используем теперь $\frac{\hbar}{l}$ в качестве параметра для разложения в ряд и будем искать решение (4) с помощью формального разложения:

$$y = y_0 + \frac{\hbar}{l} y_1 + \left(\frac{\hbar}{l}\right)^2 y_2 + \dots \tag{5}$$

Подставляя (5) в (4) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях $\frac{\hbar}{l}$, найдём:

$$\left(\frac{\hbar}{l}\right)^0 \left\{ \begin{array}{l} 0 = p^2 - y_0^2, \\ y_0 = \pm p, \end{array} \right. \tag{6}$$

$$\left(\frac{\hbar}{l}\right)^1 \left\{ \begin{array}{l} y_0' = 2y_0 y_1, \\ -2y_1 = \frac{y_0'}{y_0} = \frac{p'}{p}, \end{array} \right. \tag{7}$$

$$\left(\frac{\hbar}{l}\right)^2 \left\{ \begin{array}{l} y_1' = -y_1^2 - 2y_0 y_2, \\ -2y_2 = \frac{y_1' + y_1^2}{y_0}, \end{array} \right. \tag{8}$$

Таким образом, оказывается, что последовательные приближения y_0, y_1, y_2, \dots получаются из нулевого приближения простым дифференцированием. В дальнейшем выяснится, что приближения чётных порядков [ср. (6) и (8)] определяются с двойным знаком, в то время как приближения нечётных порядков получают определённый знак.

Таким образом, мы получаем не одно разложение (5), но два, которые мы будем обозначать через y_+ и y_- . При этом, вообще говоря, y_+ относится к положительным знакам p , а y_- — к отрицательным. Разложения y_+ и y_- переходят, конечно, друг в друга, если мы совершим в комплексной плоскости обход вокруг точки $p=0$. Итак, наше разложение (5) однозначно не на комплексной плоскости p , но на двулистной римановой поверхности $p^{1/2}$ [уравнение (3)]. Ради краткости мы допустим, что эта поверхность обладает только двумя точками ветвления, следовательно, величина p — только двумя нулями, и обозначим эти точки через $\pm a$. Итак, обобщая выражение (1), мы записываем два равноправных выражения:

$$\psi_+ = A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} y_+ dx} \quad \text{и} \quad \psi_- = A_- e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} y_- dx} \tag{9}$$

и зададимся вопросом о том, в каком смысле удовлетворяют они дифференциальному уравнению (2). Для этого представим себе y_{\pm} не в виде бесконечного, а в виде оборванного, например на третьем члене, разложения (5). Тогда уравнение Риккати будет удовлетворяться лишь с точностью до членов порядка \hbar^3 , и то же самое будет иметь место и для волнового уравнения (2). Чтобы исследовать подробнее возникающую из-за этого ошибку, нам надо будет продолжить вычисление, заключающееся в уравнениях (6) — (8). Следующий шаг даст:

$$\begin{aligned} y_2' &= -2y_0 y_3 - 2y_1 y_2, \\ -2y_3 &= \frac{y_2'}{y_0} - \frac{y_0'}{y_0^2} y_2 = \frac{d}{dx} \left(\frac{y_2}{y_0} \right). \end{aligned} \tag{10}$$

К тому обстоятельству, что y_3 , так же как и y_1 в (7), является «целым», мы вернёмся позднее. Сейчас нас интересует степень, с которой входит

знаменатель p . Для этого мы продолжим вычисление выражения (8) для y_2 :

$$\mp 2py_2 = -\frac{1}{2} \frac{p''}{p} + \frac{3}{4} \frac{p'^2}{p^2}. \quad (10a)$$

Однако в силу (3) вблизи точек $p = 0$

$$p', p'' \text{ будут порядка } p^{-1}, p^{-2},$$

и поэтому, если только V' не обращается в нуль для $p = 0$, согласно (10a) и (10)

$$y_2, y_3 \text{ будут порядка } p^{-5}, p^{-6}. \quad (10b)$$

Ошибка, которая возникает благодаря отбрасыванию члена $\hbar^3 y_3$, будет, следовательно, порядка $\frac{\hbar^3}{p^8}$. Отсюда мы заключаем: наши разложения y_{\pm} в окрестности точек $x = \pm a$, соответствующих точкам поворота классического движения, будут *расходящимися*; дифференциальные уравнения (4) и (2) будут тем *хуже* удовлетворяться оборванными на каком-либо члене разложениями, чем ближе будем мы подходить к этим критическим точкам.

Ошибка исчезает лишь в пределе при $\hbar \rightarrow 0$; но тогда наше y_{\pm} вырождается в нулевой член $y_0 = \pm p$. Этим предельным переходом мы достигаем, конечно, области классической механики. Действительно, согласно этой последней, для функции действия S имеет место соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial q_k} = p_k. \quad (11)$$

Если мы положим здесь $q_k = x$ и соответственно уравнению (1)

$$S = \int y_1 dx,$$

то (11) действительно перейдет в нулевом приближении в $\pm y_0 = p$. Поэтому мы можем ожидать и покажем это на простейшем примере, что наше разложение (5), хотя и с ограниченной точностью и только на достаточном расстоянии от критических точек $x = \pm a$, исправляет классическое решение в волномеханическое.

Ту же связь мы будем ожидать и между квантовыми условиями прежней теории и волномеханическим квантованием. Старое квантовое условие, выписанное для одной координаты x , гласило:

$$\oint p dx = \pm \oint y_0 dx = nh, \quad n — \text{целое число}. \quad (12)$$

Метод ВКБ утверждает (относительно доказательства см. ниже стр. 597), что волномеханическим уточнением этого условия будет:

$$\oint y_{\pm} dx = nh, \quad n — \text{целое число}. \quad (13)$$

Интеграл в (12) надо было брать по классической траектории от $x = -a$ до $x = +a$ и обратно, вместо чего, как известно, удобнее выполнить замкнутый обход вокруг этих точек в комплексной x -плоскости. Тот же самый обход подразумевается и в (13).

На первый взгляд может показаться, что из-за двух знаков уравнение (13) содержит *два* значения. Но легко убедиться, что оба значения оказываются *одинаковыми*. Именно, все нечетные члены разложения являются полными производными по x . Относительно y_3 это было показано в (10), для y_6 на-

ходим аналогично

$$-2y_b = \frac{d}{dx} \left[\frac{y_4}{y_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{y_2}{y_0} \right)^2 \right] \text{ и т. д.}$$

Все эти члены дают нуль при интегрировании по нашему замкнутому контуру. Исключение составляет y_1 , из-за логарифмического характера которого получается:

$$\frac{\hbar}{i} \oint y_1 dx = -\frac{\hbar}{2i} \oint \frac{dp}{p} = -\frac{\hbar}{2i} 2\pi i = -\frac{\hbar}{2}. \quad (14)$$

С другой стороны, все чётные числа y_- имеют знак, противоположный таким же членам из y_+ . Следовательно, если мы выпишем сумму интегралов всех чётных членов, учитывая (14), в виде:

$$\oint y_{\pm} dx + \frac{\hbar}{2},$$

то получим:

$$\oint y_- dx + \frac{\hbar}{2} = -\left(\oint y_+ dx + \frac{\hbar}{2} \right).$$

Следовательно, $\oint y_- dx$ оказывается целым кратным \hbar одновременно с $\oint y_+ dx$, и если в одном случае это кратное имеет вид $n\hbar$, то в другом случае $-(n+1)\hbar$.

В качестве простейшего примера рассмотрим гармонический осциллятор. Для него, согласно (1.5.1), $V = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$. Если мы положим $W = \frac{1}{2} m\omega_0^2 a^2$, то в силу (3) будет:

$$p = m\omega_0 \sqrt{a^2 - x^2}.$$

Следовательно, точками поворота классической траектории будут $x = \pm a$, так что a означает классическую амплитуду. V для этого случая регулярно во всей x -плоскости, и листы римановой поверхности для p гладко сливаются на бесконечности.

Покажем, что в этом случае при интегрировании по замкнутому контуру исчезают не только нечётные, но и все высшие члены разложения (5).

Например, член с y_2 содержит, согласно (10а, б), в знаменателе множитель $(x^2 - a^2)^{3/2}$, а в числителе — многочлен второй степени. Но поэтому подинтегральное выражение обратится в нуль, как $x^2 x^{-5} = x^{-3}$, если мы, что дозволено, растянем наш контур так, чтобы интегрировать вокруг бесконечно удалённой точки. То же самое справедливо и для членов y_4, y_6, \dots . Таким образом, кроме нулевого члена, который мы запишем в форме прежнего фазового интеграла, останется только первый член. Поэтому мы получаем вместо (13) (верхний знак):

$$\oint p dx - \frac{\hbar}{2} = n\hbar,$$

или

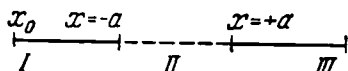
$$\oint p dx = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (15)$$

Но это — волномеханическое исправленное полуцелое квантование осциллятора (1.5.10). Действительно, левая часть (15), как то было получено уже в § 3 гл. II т. I, равна $\frac{W_n}{\nu_0}$, где W_n — энергия n -го квантового колебания, а $\nu_0 = \frac{\omega}{2\pi}$ означает собственную частоту осциллятора. Итак, (15) совпадает

с хорошо известным уравнением для энергии осциллятора:

$$W_n = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (15a)$$

Теперь мы хотим показать на этом примере, каким образом возникает из задаваемых (9) элементов приближённое представление собственных функций. Для этого нам придётся учесть требование непрерывности собственных функций ψ . Мы начнём с рассмотрения области I, $x < -a$ (см. схему).



Если мы определим p как действительное и положительное на верхнем берегу разреза II нашей римановой поверхности, обозначенной — — — — —, то в области I p будет положительным мнимым (обход в положительной полуплоскости вокруг точки $x = -a$). Так как в некотором удалении от этой точки знак y_{\pm} будет определяться знаком y_0 , то в области I для больших отрицательных x y_+ будет положительным мнимым, а y_- — отрицательным мнимым. Пусть начальная точка x_0 интеграла в (9) лежит в этой области. Тогда для $x < x_0$

$$\int_{x_0}^x y_+ dx \text{ — отриц. мним.}, \quad \int_{x_0}^x y_- dx \text{ — полож. мним.}$$

Так как этот интеграл умножается в (9) ещё на $\frac{i}{h}$ и так как на бесконечности области I ψ не может обращаться в бесконечность, то ψ_+ использовать нельзя. Мы положим поэтому (с действительным $A = A_-$):

$$\psi_I = \psi_- = A e^{\frac{i}{h} \int_{x_0}^x y_- dx}. \quad (16)$$

Это представление непригодно в окрестности $x = -a$ (сингулярность y_-); для больших отрицательных x оно приводит к экспоненциальному убыванию, следовательно, с этой точки зрения отвечает характеру точной волновой функции осциллятора на рис. 6 (стр. 37).

Напротив, в области III, в которой p действительно и, согласно (2), собственная функция ψ осциллирует, надо использовать суперпозицию обеих формул (9). Это возможно, так как уравнение (2) линейно и приближённо удовлетворяется (опять за исключением окрестностей точек $x = \pm a$) обеими формулами (9). Если учесть ещё и действительность собственной функции ψ и положить A_+ с точностью до надлежащим образом подобранного фазового множителя равным $A_- = A$, то мы придём к выражению

$$\psi_{III} = A e^{\frac{i}{h} \int_{x_0}^x y_- dx} + \text{компл.-сопр.} \quad (17)$$

Здесь имеется в виду, что интегрирование от x_0 до x совершается в обход особой точки $x = -a$ в положительной мнимой полуплоскости. Эта формула правильно передаёт осциллирующий характер собственной функции в средней части рис. 6, а при больших n и приближённые положения нулей ψ .

В области III будет опять иметь место представление типа (16), именно:

$$\psi_{III} = A e^{\frac{i}{h} \int_{x_0}^x y_- dx}. \quad (18)$$

Действительно, для больших x в области III p становится отрицательным мнимым (обход точки $x = +a$ в отрицательном направлении), а u_- — положительным мнимым. Поэтому для далёких точек области III показатель экспоненты в (18) становится действительным отрицательным, как то и должно было быть.

Наши выражения (16) — (18) справедливы не только для осциллятора, но и для любого волнового уравнения вида (2). Их доказательство, которое было бы также и первым действительным доказательством нашего утверждения (13) относительно приближённого вычисления собственных значений, завело бы нас даже и для этого простого примера слишком далеко. Оно основывается на общих теоремах относительно поведения асимптотических, т. е. расходящихся рядов в окрестности иррегулярной особой точки. Только тогда станет понятной причина изменения формы представлений (16), (17) и (18). Мы сошлёмся по этому поводу кроме стр. 707 цитированной выше работы Крамерса и Цваана на сравнительно простое изложение Данхема¹⁾.

Оценка ошибок, которая, собственно, требовалась бы для наших расходящихся и потому неизбежно обрываемых рядов, представляет, конечно, трудную задачу²⁾. Практически в большинстве случаев³⁾ удовлетворяются двумя первыми членами без оценки погрешности с целью получить хотя бы первое представление о сложной волномеханической задаче, не решающейся иным способом.

Паули⁴⁾ перенёс метод ВКБ на уравнение Дирака. Паули исследовал поведение дираковского электрона в произвольном электромагнитном поле и вывел для этого случая соответствующие нашим u_0, u_1, \dots приближения нулевого, первого, ... порядка, которые ещё содержат матрицы или (ср. примечание 4) гиперкомплексные единицы. При переходе к току или плотности эти матрицы или единицы, как то и должно было быть, выпадают в каждом приближении. Паули показал, что нулевое приближение не содержит постоянной \hbar , следовательно, и спиновых свойств электрона. Отношение тока к плотности можно определить как «скорость частицы». Тогда она получается в точности из тех же уравнений Гамильтона, что и в классической механике (включающих для больших скоростей необходимые релятивистские поправки). Отсюда следует, что опыты по отклонению катодных лучей любой скорости в любых полях происходят как раз так, как того требует классическая механика, без того чтобы при этом проявлялся спин электрона. Последний появляется только в высших приближениях, одновременно с явлениями дифракции. Тем самым доказана теорема, которую мы уже приводили на стр. 284. Эта теорема была впервые высказана Бором и подтверждена им рассмотрением характерных примеров.

¹⁾ J. L. Dunham, Phys. Rev. 41, 713 (1932); ср. также R. E. Langer, там же 51, 669 (1937), который избегает комплексного рассмотрения.

²⁾ Ср. относящиеся сюда работы E. C. Kemble, Phys. Rev. 48, 549 (1935) и его книгу «Fundamental Principles of Quantum Mechanics», New York and London, 1937 (Основные принципы квантовой механики, Нью-Йорк и Лондон, 1937).

³⁾ Ср., однако, основную работу Венцеля 1926 г., в которой эффект Штарка второго порядка смог получиться лишь из третьего члена разложения.

⁴⁾ W. Pauli, Helv. Phys. Acta 5, 179 (1932); ср. также K. Vescher, там же 6, 82 (1933). Последний пользуется вместо матриц Дирака общими гиперкомплексными единицами, что позволило ему упростить вывод Паули.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ДОПОЛНЕНИЯ

1. ВВЕДЕНИЕ ГРУППОВОЙ СКОРОСТИ.

К гл. I, § 2, равенство (14)

Обычно групповая скорость вводится на каком-либо специальном примере. Здесь будет дан вывод, основывающийся на весьма общих предположениях. Исходим из группы волн

$$U = \int_{k_0-\varepsilon}^{k_0+\varepsilon} A(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk, \quad (1)$$

т. е. предполагаем, что имеется непрерывная совокупность волн с амплитудами $A dk$, причём A и ω являются произвольными непрерывными функциями k . Такую совокупность только тогда можно назвать «группой», когда содержащиеся в ней волны имеют волновые числа, заключённые в достаточно малом интервале. Последнее обстоятельство учтено нами при выборе пределов интегрирования $k_0 \pm \varepsilon$. Преобразуем показатель степени у e следующим образом:

$$kx - \omega t = k_0 x - \omega_0 t + (k - k_0)x - (\omega - \omega_0)t.$$

Тогда получим:

$$U = C e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}, \quad (2)$$

$$C = \int_{k_0-\varepsilon}^{k_0+\varepsilon} A(k) e^{i\{(k-k_0)x - (\omega-\omega_0)t\}} dk; \quad (3)$$

C называется (комплексной) амплитудой группы. Нас интересуют такие значения x и t , для которых C имеет постоянное значение. Так как x и t входят в (3) только в показателе степени, необходимо этот показатель степени положить равным постоянной. Следовательно,

$$(k - k_0)x - (\omega - \omega_0)t = \text{const.}$$

Отсюда следует:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega - \omega_0}{k - k_0}.$$

В случае достаточно узкой группы это частное равно своему предельному значению, зависящему лишь от k_0 и не зависящему от k_0 , именно:

$$\frac{dx}{dt} = b = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0}. \quad (4)$$

Тем самым равенство (1. 2.14) доказано.

Величина b даёт скорость, с которой распространяется комплексная амплитуда C группы. Так как интенсивность волны определяется величиной C^2 , то эта интенсивность также распространяется с групповой скоростью; последнее обстоятельство соответствует общей точке зрения Осборна Рейнольдса, согласно которой групповая скорость понимается как скорость распространения энергии.

Из выражения (4) при помощи соотношения $\omega = ka = \frac{2\pi a}{\lambda}$ ($a = \frac{\omega}{k}$ — фазовая скорость) легко получается обычно употребляемое выражение для групповой скорости:

$$b = a + k \frac{da}{dk} = a - \lambda \frac{d\lambda}{d\omega}. \quad (5)$$

Далее, из (4) следует:

$$\frac{1}{b} = \frac{dk}{d\omega} = \frac{d}{d\omega} \left(\frac{\omega}{a} \right).$$

Отсюда найдём формулу, использованную де Бройлем ($v = \frac{\omega}{2\pi}$):

$$\frac{1}{b} = \frac{d}{d^v} \left(\frac{v}{a} \right). \quad (6)$$

Интересно заметить, что в «ионосфере» (слой Кенелли — Хивисайда) имеет место то же самое соотношение $ab = c^2$ [равенство (1.2.13)], что и в волновой механике, а именно мы имеем там:

$$k = \frac{1}{c} (\omega^2 - \omega_0^2)^{1/2},$$

где ω_0^2 пропорционально числу электронов в 1 см³. Отсюда следует:

$$a = \frac{\omega}{k} = c \left(1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \right)^{-1/2} \quad \text{и} \quad b = \left(\frac{dk}{d\omega} \right)^{-1} = c \left(1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \right)^{1/2}.$$

2. КРИТЕРИЙ ДВУХЧЛЕННОСТИ РЕКУРРЕНТНОЙ ФОРМУЛЫ. МЕТОД ПОЛИНОМОВ

К гл. I, § 3

Пусть интересующая нас точка будет $x = x_0$. Введём в качестве независимой переменной новую переменную

$$z = x - x_0.$$

Принимая во внимание (1.3.4), можно общее линейное дифференциальное уравнение второго порядка записать в виде:

$$z^2 Q_2(z) y'' + z Q_1(z) y' + Q_0 y = 0, \quad (1)$$

где функции $Q_i(z)$ в точке $z = 0$ являются регулярными:

$$Q_i(z) = \sum_{\mu=0}^{\infty} c_{\mu}^{(i)} z^{\mu}, \quad (2)$$

и $Q_2(z)$ не равна нулю в точке $z = 0$: $c_0^{(2)} \neq 0$.

Искомую функцию y представим в виде (1.3.3):

$$y = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} z^{\alpha+\nu}. \quad (3)$$

Согласно правилу, изложенному в (I.3.3), величина α , стоящая в показателе степени, определяется из квадратного уравнения

$$\alpha(\alpha - 1)c_0^{(2)} + \alpha c_0^{(1)} + c_0^{(0)} = 0. \quad (4)$$

Подставим в (1) значения входящих туда функций из (2) и (3). Коэффициент при z с низшей степенью, именно при z^2 , обращается в нуль в силу выполнения уравнения (4). Приравнявая нулю коэффициенты при высших степенях z , например при $z^{\alpha+\nu}$, получим рекуррентную формулу:

$$\begin{aligned} a_\nu c_0^{(2)}(\alpha + \nu)(\alpha + \nu - 1) + a_{\nu-1} c_1^{(2)}(\alpha + \nu - 1)(\alpha + \nu - 2) + \dots \\ \dots + a_\nu c_0^{(1)}(\alpha + \nu) + a_{\nu-1} c_1^{(1)}(\alpha + \nu - 1) + \dots \\ \dots + a_\nu c_0^{(0)} + a_{\nu-1} c_1^{(0)} + \dots = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Это уравнение определяет коэффициент a_ν через предыдущие коэффициенты $a_{\nu-1}, a_{\nu-2}, \dots, a_0$; a_0 остаётся произвольным, так как коэффициент при $a_0 z^\alpha$ был обращён в нуль на основании уравнения (4).

Множитель при a_ν в уравнении (5) будет равен

$$C = c_0^{(2)}(\alpha + \nu)(\alpha + \nu - 1) + c_0^{(1)}(\alpha + \nu) + c_0^{(0)}.$$

Принимая во внимание уравнение (4), последнее выражение можно привести к виду:

$$C = \nu \left\{ c_0^{(2)}(2\alpha + \nu - 1) + c_0^{(1)} \right\} = \nu c_0^{(2)} \left\{ 2\alpha + \nu - \frac{c_0^{(2)} - c_0^{(1)}}{c_0^{(2)}} \right\}. \quad (6)$$

Это выражение обращается в нуль лишь в том случае, когда член, заключённый в фигурные скобки, обращается в нуль (так как $c_0^{(2)} \neq 0$; см. выше). Но сумма корней уравнения (4) будет равна

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \frac{c_0^{(2)} - c_0^{(1)}}{c_0^{(2)}}.$$

Поэтому условие обращения в нуль члена, заключённого в фигурные скобки, гласит:

$$2\alpha + \nu = \alpha_1 + \alpha_2, \quad (7)$$

т. е. (поскольку α равно либо α_1 , либо α_2):

$$\left. \begin{aligned} \alpha_2 - \alpha_1 = \nu & \quad \text{для } \alpha = \alpha_1; \\ \alpha_2 - \alpha_1 = -\nu & \quad \text{для } \alpha = \alpha_2. \end{aligned} \right\} \quad (7a)$$

Отсюда заключаем, что если только разность корней α_1 и α_2 не является целым числом, то C не обращается в нуль и, следовательно, рекуррентная формула может быть решена относительно α . На особый случай равенства целому числу разности корней было уже указано на стр. 20.

Для более подробного исследования этого особого случая предположим, что α_2 является алгебраически наибольшим из обоих корней (или в случае комплексных корней является корнем с алгебраически наибольшей действительной частью). В этом случае второе условие (7a) не может быть выполнено, так как левая часть равенства будет положительна, а правая отрицательна. Следовательно, для наибольшего из корней величина C не может обратиться в нуль. Вычисление коэффициентов по рекуррентной формуле

оказывается возможным, и искомое решение дифференциального уравнения в окрестности точки $z = 0$ может быть разложено в степенной ряд.

Иначе обстоит дело для меньшего из корней $\alpha = \alpha_1$. В этом случае первое из условий (7а) при целочисленном значении разности корней даёт такое значение ν , начиная с которого разложение в степенной ряд оказывается невозможным и могут появиться особенности, например логарифмические члены, на что было уже указано на стр. 20.

В качестве примера укажем на сферические функции (стр. 21). Корни уравнения (1.3.6)

$$\alpha_2 = +\frac{m}{2}, \quad \alpha_1 = -\frac{m}{2}, \quad m > 0, \quad (76)$$

имеют целочисленную разность m . Наименьший корень α_1 нас не интересует, так как соответствующее ему решение не будет непрерывным. Для наибольшего корня α_2 решение может быть найдено при помощи рекуррентной формулы и представляется в виде степенного ряда, который в данном случае обрывается.

Обратимся теперь к вопросу об общем условии обрыва ряда. Этот вопрос является частью другого, поставленного в заглавии: когда рекуррентная формула (5) будет двухчленной? Во всяком случае $Q_2(z)$ должна содержать только две степени z ; один член будет z^1 , так как $c_0^{(2)} \neq 0$, другой член пусть будет z^h . Следовательно, мы имеем:

$$Q_2(z) = c_0^{(2)} z^0 + c_h^{(2)} z^h.$$

Тогда члены в формуле (5), полученные за счёт $Q_2(z)$, будут равны

$$a_\nu c_0^{(2)} (\alpha + \nu)(\alpha + \nu - 1) + a_{\nu-h} c_h^{(2)} (\alpha + \nu - h)(\alpha + \nu - h - 1).$$

Поэтому и остальные члены формулы (5) должны содержать только a_ν и $a_{\nu-h}$. Следовательно, в Q_1 и Q_0 коэффициентами, отличными от нуля, должны быть лишь

$$c_0^{(1)}, c_h^{(1)} \quad \text{и} \quad c_0^{(0)}, c_h^{(0)}.$$

Введём более простые обозначения:

$$A_i = c_0^{(i)}, \quad B_i = c_h^{(i)}.$$

Мы должны потребовать, чтобы

$$Q_i(z) = A_i + B_i z^h, \quad A_2 \neq 0, \quad (8)$$

h — положительное целое число.

Поэтому, для того чтобы дифференциальное уравнение (1) могло быть разрешено при помощи двухчленной рекуррентной формулы, оно должно иметь вид:

$$z^2 (A_2 + B_2 z^h) y'' + z (A_1 + B_1 z^h) y' + (A_0 + B_0 z^h) y = 0. \quad (9)$$

Характеристическое уравнение (4) для показателя степени α запишется теперь в виде:

$$\alpha(\alpha - 1) A_2 + \alpha A_1 + A_0 = 0, \quad (10)$$

и рекуррентная формула (5) перепишется следующим образом:

$$a_\nu \{ A_2 (\alpha + \nu)(\alpha + \nu - 1) + A_1 (\alpha + \nu) + A_0 \} + a_{\nu-h} \{ B_2 (\alpha + \nu - h)(\alpha + \nu - h - 1) + B_1 (\alpha + \nu - h) + B_0 \} = 0. \quad (11)$$

Теперь мы можем формулировать *условие обрыва* в смысле метода полинома. Пусть n будет высшая степень полинома. Тогда $a_n \neq 0$ и, кроме того, должно быть:

$$a_{n+h} = a_{n+2h} = \dots = 0.$$

Это даёт на основании (11) уравнение (полагая $v = n + h$):

$$B_2(\alpha + n)(\alpha + n - 1) + B_1(\alpha + n) + B_0 = 0, \quad (12)$$

где n — целое положительное число, кратное h .

Чтобы это уравнение имело решения, необходимо, очевидно, чтобы некоторый параметр, от которого зависит B , имел определённые значения. Тем самым этот параметр «проквантован», т. е. поставлен в соотношение с целым числом n .

Проиллюстрируем это лишь на примере ротатора, подчеркнув, однако, что вышеизложенным методом могут быть решены все задачи на собственные значения, к которым приводят разрешимые элементарным образом волномеханические проблемы. В случае ротатора мы исходим из дифференциального уравнения (1.3.8), полагаем $x - 1 = z$ и умножаем уравнение на z , чтобы привести его к виду (9). Тогда получится:

$$z^2(z + 2)v'' + 2(m + 1)z(z + 1)v' + (m + m^2 - \lambda)zv = 0.$$

Поэтому мы имеем:

$$A_2 = 2, \quad B_2 = 1; \quad A_1 = B_1 = 2(m + 1); \quad A_0 = 0, \quad B_0 = m(m + 1) - \lambda. \quad (13)$$

Величина h в данном случае равна единице.

Уравнение (10) при учёте (13) принимает вид:

$$2\alpha(\alpha + 1) + 2(m + 1)\alpha = 0.$$

Следовательно, $\alpha = 0$, так как другой корень $\alpha = -m$, будучи отрицательным, для решения задачи не подходит [ср. также рассуждения к равенствам (76)].

Уравнение (12) теперь запишется в виде:

$$n(n - 1) + 2(m + 1)n + m(m + 1) = \lambda. \quad (14)$$

Тем самым параметр λ «проквантован» степенью n полинома. Левая часть равенства (12) равна $(n + m)(n + m + 1)$. Введя обозначение $n + m = l$, получим «собственные значения»

$$\lambda = l(l + 1), \quad (15)$$

как и в (1.3.11).

Существует самый тесный параллелизм между методами интегрирования задач, решаемых на основании волновой и классической механики: если уравнение Шредингера некоторой задачи может быть решено в определённых координатах методом разделения переменных, то и дифференциальное уравнение Гамильтона — Якоби той же задачи также допускает разделение переменных в тех же координатах.

Если уравнение Шредингера ведёт к *двулученной* рекуррентной формуле и, следовательно, собственные значения могут быть вычислены по методу полиномов, то соответствующее уравнение Гамильтона — Якоби интегрируется в *элементарных* функциях. Если же уравнение Гамильтона — Якоби интегрируется в *эллиптических* функциях, то соответствующее уравнение Шре-

дингера ведёт в *трёхчленной* рекуррентной формуле; в этом случае вычисление собственных значений ведётся по способу непрерывных дробей¹⁾. В качестве примера можно привести задачу о двух центрах в случае иона молекулы водорода (ср. гл. X, § 2).

8. ГАМИЛЬТОНОВА ФУНКЦИЯ ЭЛЕКТРОНА. О НОРМИРОВКЕ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА И КАЛИБРОВОЧНОЙ ИНВАРИАНТНОСТИ

К гл. I, § 6, Б и Г

Прежде всего покажем, что из выражения (1.6.46)

$$L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2} \sum \dot{q}^2 - V(q) + \frac{e}{c} (\dot{q}A) \quad (1)$$

по правилу написания лагранжевых уравнений следуют правильные уравнения движения материальной точки массы m ; m здесь предполагается постоянной. Электродинамическое поле, действующее на e , выражается хорошо известными формулами через потенциалы V и A :

$$E = -\text{grad } V - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad H = \text{rot } A. \quad (2)$$

Взяв от (1) производные по компонентам \dot{q} , получим:

$$p = m\dot{q} + \frac{e}{c} A. \quad (3)$$

Отметим, что *канонический* импульс p не равен элементарному импульсу $m\dot{q}$ в согласии с т. I, дополнение 5, равенство (23). Из (3) следует, что

$$\dot{q} = \frac{1}{m} \left(p - \frac{e}{c} A \right). \quad (3a)$$

Далее, дифференцируя (3) по t в прямоугольных координатах, найдём:

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= m\ddot{x} + \frac{e}{c} \dot{A}_x = \\ &= m\ddot{x} + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Это есть левая часть x -компоненты уравнения Лагранжа:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}.$$

Правая часть на основании (1) равна

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{e}{c} \left(\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right).$$

Из сравнения правой и левой частей следует, что

$$m\ddot{x} = -\frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{e}{c} \left\{ \dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) + \dot{z} \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right\}. \quad (5)$$

¹⁾ Это показал M. F. Manning, Phys. Rev. 48, 161 (1935).

Учитывая (2), последнее равенство можно записать в виде:

$$m\ddot{x} = eE_x + \frac{e}{c} [\mathcal{O}H]_x. \quad (5a)$$

Это есть x -компонента элементарного уравнения движения электрона. Тем самым данная в (1) форма функции Лагранжа оправдана.

Теперь на основании правил общей динамики образуем

$$H(q, p) = \sum p_k \dot{q}_k - L, \quad (6)$$

где в правой части для L необходимо взять выражение (1), а для \dot{q} — выражение (3a).

Тогда получим:

$$H = \frac{1}{m} \left(p, p - \frac{e}{c} A \right) - \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 + V - \frac{1}{m} \left(\frac{e}{c} A, p - \frac{e}{c} A \right).$$

Легко заметить, что, отвлекаясь от знака, сумма первого и последнего члена равна удвоенной величине второго члена. Поэтому

$$H = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 + V. \quad (7)$$

Тем самым получено выражение оператора Гамильтона, данное в (1.6.4в).

Вернёмся к ограничению $\text{div } A = 0$, которое мы должны были сделать в уравнении (1.6.5). Это ограничение соответствует определению вектор-потенциала в случае «квазистационарных» полей электродинамики, в то время как в случае быстро переменных полей оно заменяется условием

$$\text{div } A = - \frac{1}{ec} \frac{\partial V}{\partial t}, \quad (8)$$

или в релятивистской записи

$$\text{Div } \Phi = 0, \quad \Phi = \left(A, i \frac{V}{e} \right). \quad (8a)$$

Условие (8) мы использовали в (1.6.12a). Неправильно думать, что дополнительные условия (8) или (8a) следуют из каких-то электродинамических соображений. Введение 4-потенциала Φ сделано лишь с целью более удобного представления напряжённостей поля по известной формуле

$$F_{ik} = \text{Rot}_{ik} \Phi = \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}, \quad (9)$$

которая согласуется с несимметрично написанной формулой (2). (F_{ik} означает в своих пространственно-пространственных компонентах H , а в своих пространственно-временных компонентах — iE .) Заменим теперь в (9) Φ через

$$\Phi' = \Phi + \text{Grad } f, \text{ функция } f = f(x_1, \dots, x_4) \text{ произвольна;} \quad (10)$$

тогда F_{ik} остаются без изменения; следовательно, условие (8a) не является необходимым, так как при замене Φ на Φ' оно перестаёт выполняться.

Эта неопределённость потенциала, определённого лишь с точностью до градиента произвольной функции, для электродинамики несущественна, так как здесь мы имеем дело только с напряжённостями поля F . Однако для волновой механики эта неопределённость потенциала создаёт некоторые трудности, поскольку волновая механика оперирует непосредственно с потенциалами.

С целью преодоления этих трудностей прежде всего покажем, что если u является решением самого общего волнового уравнения (1.6.12) с потенциалами A и V , то

$$u' = u e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \quad (11)$$

является решением того же уравнения, но с потенциалами A' и V' ; под A' и V' мы понимаем компоненты Φ' , образованные по схеме второго уравнения (8а), а именно:

$$A' = A + \text{grad } f, \quad V' = V - \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (12)$$

Для того чтобы A' и V' были, так же как и A и V , действительными, необходимо сделанное к (10) замечание «произвольна» несколько ограничить в том смысле, что хотя f произвольна, но должна быть действительной функцией.

Для доказательства содержащегося в (11) утверждения прежде всего убедимся, что на основании (11) и (12) имеют место следующие соотношения:

$$\left(V' + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) u' = \left\{ \left(V + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) u \right\} e^{\frac{ie}{\hbar c} f}, \quad (13)$$

$$\left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A' \right) u' = \left\{ \left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A \right) u \right\} e^{\frac{ie}{\hbar c} f}, \quad (13a)$$

где стоящие в правых частях операторы действуют только на величину u и не действуют на экспоненциальный множитель. Итерируя (13а), получим:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A' \right)^2 u' = \left\{ \left(\frac{\hbar}{i} \text{grad} - \frac{e}{c} A \right)^2 u \right\} e^{\frac{ie}{\hbar c} f}. \quad (13b)$$

Образуя теперь сумму

$$(13) + \frac{1}{2m} (13b),$$

получим слева дифференциальное выражение из уравнения (1.6.12) с u' , V' , A' , а справа — то же выражение, образованное из u , V , A . Так как по предположению последнее выражение равно нулю, то равно нулю также и выражение, стоящее слева. Тем самым доказано, что u' является решением волнового уравнения с потенциалами V' и A' .

Как нами было определено выше, стоящий в (11) при u множитель по абсолютной величине равен единице. Следовательно, этот множитель выпадает при образовании плотности uu^* независимо от того, идёт ли речь о плотности в собственном смысле этого слова или о плотности перехода $u_n u_m^*$. То же самое имеет силу и в случае тока (и других величин, имеющих физический смысл). Вычислим, например, по уравнению (1.7.7) ток, отправляясь от штрихованных величин. Тогда, с одной стороны, вследствие наличия обоих градиентов у нас появится член

$$\frac{\hbar}{2im} u^* u \left\{ \frac{ie}{\hbar c} \text{grad } f - \left(\frac{-ie}{\hbar c} \right) \text{grad } f \right\} = \frac{e}{mc} u^* u \text{grad } f,$$

но, с другой стороны, такой же член, но с отрицательным знаком появится вследствие наличия дополнительного слагаемого при u в равенстве (12).

Следовательно, физически существенный вектор плотности тока при переходе от нештрихованных величин к штрихованным остаётся без изменения. То обстоятельство, что волновая функция при этом переходе изменяет

свою аналитическую форму, является несущественным, так как на волновую функцию (сравни стр. 52) надо смотреть как на вспомогательную вычислительную величину.

Независимость результатов волновой механики от преобразований, выражаемых равенствами (11) и (12), называется *калибровочной инвариантностью*. Для целей волновой механики она вслед за Вейлем была исследована Фоком¹⁾ и Лондоном²⁾. Крайним специальным случаем общей калибровочной инвариантности является утверждение, что волномеханические результаты (но не волновые функции) не зависят от аддитивной постоянной, которую можно добавить к потенциальной энергии V , на что было уже указано на стр. 18.

Во всём этом пункте мы проводили вычисления, пользуясь нерелятивистскими формулами, так как считали массу частицы m постоянной. Теперь покажем, что полученные результаты, в особенности равенство (3), правильны и в релятивистской механике. Для этого необходимо в выражении (1) для функции Лагранжа в соответствии с указанием в т. I, дополнение 6 величину $\frac{m}{2} \sum \dot{q}^2$ заменить выражением

$$F = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} + \text{const}, \quad \beta^2 = \frac{1}{c^2} \sum \dot{q}^2,$$

а не через релятивистскую форму кинетической энергии. Дифференцирование измененной таким образом функции Лагранжа даёт опять равенство (3), но теперь

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

имеет смысл переменной массы. Легко также убедиться, что из соответствующим образом изменённого вариационного принципа

$$\delta \int F dt = 0, \quad (14)$$

или, что то же самое, по правилам написания уравнений Лагранжа, получаются правильные релятивистские уравнения движения в заданном магнитном поле A . Вычисления проводятся так же, как и в равенствах (4) и (5), с той лишь разницей, что теперь везде необходимо написать $\frac{d}{dt} m \dot{x}$ вместо $m \ddot{x}$, так как m переменна.

4. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ О СОПРЯЖЁННОМ УРАВНЕНИИ. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ

К гл. I, § 7

В § 7 было определено понятие сопряжённого уравнения лишь в применении к типам уравнений, которые появлялись при рассмотрении простейших задач волновой механики в прямоугольных координатах. Теперь мы рассмотрим общий тип линейного дифференциального уравнения второго порядка (лишь в применении к *линейным* дифференциальным выражениям имеет смысл постановка вопроса о сопряжённом выражении!); ограничение двумя независимыми переменными x и y , которое здесь принимается, не является существенным и имеет целью несколько сократить формулы.

¹⁾ V. Fock, Zs. f. Phys. 39, 226 (1926).

²⁾ Fr. London, там же 42, 375 (1927).

Пусть A, B, \dots, F будут произвольные, но достаточное число раз дифференцируемые функции x и y . Самое общее линейное дифференциальное выражение для зависимой переменной u имеет вид:

$$L(u) = A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + Fu. \quad (1)$$

Умножим это выражение на другую зависимую переменную v и почленно преобразуем произведение таким способом, чтобы операцию дифференцирования «перенести» с u на v . Тогда, например, получим:

$$\begin{aligned} vA \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(vA \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial Av}{\partial x} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(vA \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial Av}{\partial x} \right) + u \frac{\partial^2 (Av)}{\partial x^2}, \\ vB \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(vB \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial Bv}{\partial x} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(vB \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(u \frac{\partial Bv}{\partial x} \right) + u \frac{\partial^2 (Bv)}{\partial x \partial y} \end{aligned}$$

или также

$$\begin{aligned} vB \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(vB \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial Bv}{\partial y} = \\ &= \frac{\partial}{\partial y} \left(vB \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial Bv}{\partial y} \right) + u \frac{\partial^2 (Bv)}{\partial x \partial y} \quad \text{и т. д.} \end{aligned}$$

Произведя суммирование, будем иметь:

$$vL(u) - uM(v) = \frac{\partial S_x}{\partial x} + \frac{\partial S_y}{\partial y} = \operatorname{div} S, \quad (2)$$

где для сокращения записи положено:

$$M(v) = \frac{\partial^2 (Av)}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 (Bv)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 (Cv)}{\partial y^2} - \frac{\partial (Dv)}{\partial x} - \frac{\partial (Ev)}{\partial y} + Fv. \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} S_x &= A \frac{\partial u}{\partial x} v - u \frac{\partial Av}{\partial x} + B \frac{\partial u}{\partial y} v - u \frac{\partial Bv}{\partial y} + u Dv, \\ S_y &= C \frac{\partial u}{\partial y} v - u \frac{\partial Cv}{\partial y} + B \frac{\partial u}{\partial x} v - u \frac{\partial Bv}{\partial x} + u Ev. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Дифференциальное выражение M называется сопряжённым к дифференциальному выражению L . Двухкомпонентная величина $S = S_x, S_y$ называется «вектором тока». Если u является решением дифференциального уравнения $L(u) = 0$, а v — решением дифференциального уравнения $M(v) = 0$, то для вектора тока на основании (2) имеет место «закон сохранения»

$$\operatorname{div} S = 0. \quad (5)$$

Соотношение между исходным и сопряжённым уравнениями взаимно, как это непосредственно следует из определения (2). Следовательно, если M является сопряжённым выражением к L , то и L является также сопряжённым выражением к M .

Если $M = L$, то выражение называется *самосопряжённым*. Условия самосопряжённости, как это непосредственно видно после вычисления (3) и

сравнения полученного выражения с (1), гласят:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial y} &= D, & \frac{\partial B}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} &= E, \\ \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 B}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} &= \frac{\partial D}{\partial x} + \frac{\partial E}{\partial y}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Этот случай имеет место, например, в выражении $L(u) = \Delta u$, где $A = C = 1$, $B = D = E = F = 0$ и $S = v \operatorname{grad} u - u \operatorname{grad} v$.

Интегрированием (2) по произвольной области σ плоскости xu с границей s получаем обобщённую форму формулы Грина ¹⁾:

$$\int \{vL(u) - uM(v)\} d\sigma = \int S_n ds, \quad (7)$$

где S_n — нормальная составляющая вектора S к кривой, ограничивающей область интегрирования, причём за положительное направление принимается направление внешней нормали.

Можно получить и вторую форму обобщённой формулы Грина. Умножим выражение (1) на v и однократно (а не двукратно, как было сделано раньше) «перебросим» операцию дифференцирования с u на v . Прделав эти преобразования, получим:

$$\left. \begin{aligned} vL(u) + \Delta &= \operatorname{div} P, \\ \Delta &= \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial Av}{\partial x} + \frac{\partial Bv}{\partial y} \right) + \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial Bv}{\partial x} + \frac{\partial Cv}{\partial y} \right) + u \left(\frac{\partial Dv}{\partial x} + \frac{\partial Ev}{\partial y} - Fv \right), \\ P_x &= v \left(A \frac{\partial u}{\partial x} + B \frac{\partial u}{\partial y} + Du \right), & P_y &= v \left(B \frac{\partial u}{\partial x} + C \frac{\partial u}{\partial y} + Eu \right). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Исходя из сопряжённого выражения $M(v)$ (преобразование «перебрасыванием» операции дифференцирования здесь применяются только к первым трём членам суммы), будем иметь:

$$\left. \begin{aligned} uM(v) + \Delta &= \operatorname{div} Q, \\ Q_x &= u \left(\frac{\partial Av}{\partial x} + \frac{\partial Bv}{\partial y} \right), & Q_y &= u \left(\frac{\partial Bv}{\partial x} + \frac{\partial Cv}{\partial y} \right), \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где Δ имеет то же значение, что и в (8), и является билинейным выражением относительно u , v и их производных, которое отнесено одновременно к обоим дифференциальным выражениям L и M . Далее, интегрируя (8) и (9) по замкнутой области σ плоскости xu с границей s и внешней нормалью n , найдём:

$$\left. \begin{aligned} \int vL(u) d\sigma + \int \Delta d\sigma &= \int P_n ds, \\ \int uM(v) d\sigma + \int \Delta d\sigma &= \int Q_n ds. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Эта пара уравнений и является искомой второй формой формулы Грина. Если $L = M$, т. е. имеет место случай самосопряжённости, то эта пара уравнений сводится к одному уравнению. В этом случае выражение Δ будет

¹⁾ По вопросу применения этой формулы в общей теории краевых задач (однозначность решений, представленные посредством функции Грина) ср. Елзукл. d. math. Wiss. II, 1, стр. 513.

симметричным относительно u и v , так как на основании (6) можно записать:

$$\Lambda = A \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + B \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + C \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial Duv}{\partial x} + \frac{\partial Euv}{\partial y} - Fuv. \quad (11)$$

Одновременно, как это показывается на основании (6), будет иметь место равенство $Q(u, v) = P(v, u)$. Таким образом, в случае самосопряжённости оба уравнения в (10) отличаются друг от друга лишь заменой u на v . В случае самосопряжённого уравнения для потенциала ($A = C = 1$, $B = D = E = F = 0$ см. выше) получается хорошо известная формула Грина

$$\int v \Delta u \, d\sigma + \int \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\sigma = \int v \frac{\partial u}{\partial n} \, ds$$

и формула, получающаяся отсюда путём перемены местами u и v .

Образует теперь вариацию первого из уравнений (10). При варьировании мы изменим функции u и v внутри области интегрирования на произвольные (непрерывные, достаточно малые) добавки δu и δv , на границе же области интегрирования u и v и их первые производные сохраним без изменения. В результате этого получим:

$$\delta \int \Lambda \, d\sigma = - \int \delta v L(u) \, d\sigma - \int v L(\delta u) \, d\sigma. \quad (12)$$

Второй интеграл преобразуем по формуле (7), положив в ней u равным δu и учтя, что S_n в этом случае исчезает на границе интегрирования. В результате будем иметь равенство

$$\int v L(\delta u) \, d\sigma = \int \delta u M(v) \, d\sigma.$$

Подстановка последнего равенства в (12) даёт:

$$\delta \int \Lambda \, d\sigma = - \int \delta v L(u) \, d\sigma - \int \delta u M(v) \, d\sigma. \quad (13)$$

К этому же результату приводит варьирование второго из уравнений (10). Вариационное требование

$$\delta \int \Lambda \, d\sigma = 0 \quad (14)$$

влечёт за собой вследствие произвольности δu и δv внутри всей области интегрирования одновременное выполнение дифференциальных уравнений

$$L(u) = 0, \quad M(v) = 0. \quad (14a)$$

Положение дел здесь таково же, как и в классической механике, где вариационный принцип Гамильтона эквивалентен механическим дифференциальным уравнениям.

В основе первой работы Шредингера лежит вариационный принцип:

$$\delta \int \Lambda \, d\tau = 0, \quad \Lambda = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - V) \psi^2. \quad (15)$$

Вариационный принцип (15) следует из вариационного принципа (14), если только в последнем положить $u = v = \psi$, ввести координату z и в (11) использовать условие самосопряжённости, что даёт $A = C = 1$, $B = D = E = 0$.

Вариационному принципу (15) можно вместе со Шредингером¹⁾ придать ещё следующую, более удовлетворительную форму:

$$\delta \int H d\tau = 0, \quad H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right] + V\psi^2 \quad (15a)$$

с условием нормировки

$$\int \psi^2 d\tau = 1. \quad (15b)$$

Если ввести множитель Лагранжа, который мы здесь обозначим через W , то оба условия (15a, б) можно записать в виде одной формулы:

$$\delta \int (H - W\psi^2) d\tau = 0, \quad (16)$$

что совпадает с (15) с точностью до несущественного постоянного множителя $\hbar^2/2m$. Форма (15a) является более удовлетворительной, чем форма (15), потому что в неё не входит собственное значение W ; это собственное значение само определяется в качестве множителя лишь в процессе варьирования.

Обозначение H в (15a) использовано для того, чтобы напомнить о «гамильтоновой функции» и, следовательно, о полной энергии $E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}}$.

Выражение $\int H d\tau$, которое варьируется в (15a), совпадает с волномеханическим средним значением \bar{H} оператора Гамильтона H , как это непосредственно следует из уравнения (III.2.13), с $u = u^* = \psi$ после интегрирования по частям. Следовательно, формула (16) гласит, что полная энергия, вычисленная с помощью функции ψ , принимает наименьшее значение, совместимое с условием нормировки. Это утверждение, очевидно, справедливо не только в рассмотренном здесь случае отдельного электрона, но и в случае произвольной многоэлектронной системы. Это обстоятельство было использовано в гл. X, § 1, где необходимо было обсудить применение весьма эффективного метода Хиллерааса к вычислению термов гелия. Метод Хиллерааса состоит в том, чтобы численными методами определить минимум (соответственно экстремальные значения) в (15a) и тем самым получить собственное значение основного терма (соответственно более высоких термов).

5. О МУЛЬТИПОЛЬНОМ ИЗЛУЧЕНИИ

К гл. I, § 8 и гл. II, § 6 и 7

В гл. I, стр. 60 было сделано различие между дипольным излучением (которое обычно только и принимается во внимание) и более высокими типами излучения, которые носят название квадрупольного, октупольного, вообще *мультипольного* излучения. Как будет показано, каждый тип излучения разлагается на электрическую и магнитную части.

В первом разделе будут даны фактические сведения о мультипольном излучении, его правилах отбора и интенсивности и особенно будут обсуждены условия, благоприятствующие наблюдению квадрупольного излучения, какой бы природы, космической или земной, оно ни было. Во втором разделе будет дано теоретическое обоснование этих фактов.

¹⁾ В конце первой работы в Ann. d. Phys. 79, 734 (1926); ср. в особенности стр. 747.

1. Фактические сведения о мультипольном излучении

1а) Правила отбора для электрического мультипольного излучения в случае одного оптического электрона. В гл. II, § 5 мы нашли следующие правила отбора для электрического дипольного излучения в случае одного оптического электрона (водород, щелочные элементы):

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1. \quad (1)$$

Соответствующие правила для электрического квадрупольного излучения гласят:

$$\Delta l = 0, \pm 2, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (2)$$

Для электрического октупольного излучения эти правила обобщаются следующим образом:

$$\Delta l = \pm 1, \pm 3, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3. \quad (2a)$$

Если принять во внимание спин, то для полного момента j , являющегося суммой орбитального момента и спина, при электрическом дипольном излучении получим следующее правило:

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (\text{переход } 0 \rightarrow 0 \text{ запрещён}). \quad (3)$$

Для электрического квадрупольного излучения будем иметь:

$$\Delta j = 0, \pm 1, \pm 2 \quad \left(\text{переходы } 0 \rightarrow 0, \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}, 0 \leftrightarrow 1 \text{ запрещены} \right). \quad (4)$$

1б) Общие правила отбора. Для атомов со многими оптическими электронами для дипольного излучения имеет место *правило Лапорта* (ср. т. I, гл. VIII, § 3): термы атома распадаются на два класса; термы, принадлежащие каждому из классов, называются чётными и нечётными. Дозволенными переходами тогда будут переходы между чётными и нечётными термами, или наоборот. Вместо этого правила для электрического квадрупольного излучения имеет место другое правило: дозволенными переходами являются переходы между какими-либо двумя чётными термами, либо между какими-либо двумя нечётными.

Для октупольного излучения правила отбора опять требуют комбинации чётных и нечётных термов. Для высших типов мультипольного излучения эти правила соответственно чередуются.

Правила (3) и (4) справедливы и в многоэлектронных системах для суммарного момента импульса J всех орбитальных моментов и спинов электронов.

1в) Особые правила в случае связи Ресселл-Саундерса. В этом случае орбитальные моменты l_i векторно складываются в результирующий момент L и спиновые моменты s_i алгебраически складываются в результирующий момент S [ср. т. I, (VII.3.1), (VIII.3.2) или (VIII.5.1), (VIII.5.2)]. Тогда, согласно с изложенным в т. I (VIII.3.6), для электрического дипольного излучения имеют место правила:

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{переход } 0 \rightarrow 0 \text{ запрещён}), \quad \Delta S = 0. \quad (5)$$

Для электрического квадрупольного излучения будем иметь:

$$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (\text{переход } 0 \rightarrow 0 \text{ запрещён}), \quad \Delta S = 0. \quad (6)$$

1г) Правила отбора для магнитного дипольного излучения. Вместо (1) в этом случае справедливо правило

$$\Delta l = 0, \quad \Delta m = 0, \pm 1. \quad (7)$$

Правило (3) сохраняется. В смысле общего правила Лапорта магнитное дипольное излучение ведёт себя как электрическое квадрупольное излучение, т. е. лишь термы одного и того же класса могут комбинироваться между собой. Следует обратить внимание, что в случае одного оптического электрона необходимым следствием (7) является условие

$$\Delta l = 0, \quad (8)$$

из которого получается, что в этом случае нет излучения энергии. То же самое имеет место и при наличии многих электронов в случае связи Ресселл — Саундерса. Поэтому магнитное дипольное излучение следует ожидать лишь в случае сложных схем связи. Вероятно, линия $\lambda = 4618$ в спектре Рb I является примером магнитного дипольного излучения¹⁾.

Id) Типичные примеры из астрофизики. Проиллюстрируем эти общие и особые правила на примере рис. 116, 115 из т. I. На этих рисунках приведены зелёная линия, наблюдаемая в северном сиянии, $\lambda = 5577,3$ и небулиевые линии $\lambda = 5006,8$ и $\lambda = 4958,9$; эти линии принадлежат соответственно к спектрам OI и OIII. Термы 1S , 1D , 3P , изображённые на обоих рисунках, соответствуют одинаковой конфигурации, $l_1 = l_2 = 1$ (ср. т. I, гл. VIII, § 3, Б). В случае OIII речь идёт о двух имеющихся электронах, в случае OI — о двух недостающих до полной L -оболочки электронах. В смысле правила Лапорта все три терма являются чётными с $\Sigma l_i = 2$. Электрические дипольные переходы между ними запрещены, квадрупольные переходы дозволены. Как известно, такие состояния, из которых атом не может посредством дипольного излучения перейти в энергетически более низкие состояния, называются *метастабильными* (стабильным состояние будет только тогда, когда речь идёт об энергетически наименьшем состоянии). Наличие квантового перехода с $\Delta J = 2$ в случае линии, наблюдаемой в северном сиянии (переход $^1S_0 \rightarrow ^1D_2$), который при дипольном излучении [условие (3)] запрещён, указывает также на квадрупольный характер излучения. С другой стороны, интеркомбинационный характер небулиевых линий, $^1D_2 \rightarrow ^3P_{2,1}$, указывает, что в этом случае имеется отклонение от чистой связи Ресселл — Саундерс, обусловленное L — S -взаимодействием (в случае чистой связи Ресселл — Саундерса должно быть $\Delta S = 0$, в случае же небулиевых линий имеет место $\Delta S = 1$). В пункте Iz) будет показано, что квадрупольный характер линии, наблюдаемой в северном сиянии, прямо подтверждается её поведением в эффекте Зеемана.

Ie) Соотношение интенсивностей дипольного и квадрупольного излучений. Интенсивность линии излучения определяется вероятностью перехода, т. е. числом переходов с верхнего уровня на нижний, которые в среднем совершает атом в единицу времени в стационарном процессе (при соответствующем повторном заполнении верхнего уровня). Величина, обратная вероятности перехода, имеющая размерность времени, называется *продолжительностью жизни* атома в верхнем состоянии, причём предполагается, что, кроме рассматриваемого перехода на нижний уровень, никаких других возможностей для перехода не имеется.

Вероятность перехода для электрических квадрупольных линий, вычисленная по схематическим моделям, оказывается примерно в 10^6 раз меньше, чем для дипольных линий. Это соотношение 10^6 между линиями, дозволенными и запрещёнными правилами отбора для дипольного излучения, подтверждено экспериментально на линии поглощения щелочных элементов (дозволенные линии $s \rightarrow p$, запрещённые $s \rightarrow d$). Вероятности перехода для

¹⁾ J. Blaton a. H. Niewodniczanski, Phys. Rev. 45, 64 (1934).

(едва наблюдаемых) октупольных линий, как и следовало ожидать, снова в 10^6 раз меньше, чем для квадрупольного излучения.

Магнитное дипольное излучение, как мы видели, может на основании общего правила Лапорта происходить совместно с электрическим квадрупольным излучением. Соотношение интенсивностей между ними зависит от особых соотношений связи. Когда магнитному дипольному излучению нет препятствий, как в случае связи Расселл—Саундерса или в одно-электронной системе, то оно по интенсивности может даже превзойти электрическое квадрупольное излучение. Согласно обстоятельному исследованию Кондона¹⁾, охватывающему все важные в астрофизике факты смешанного магнитного дипольного и электрического квадрупольного излучения, этот случай имеет место у небулиевых линий.

Приведённые численные оценки относятся к области видимого света. В рентгеновской области определяющим фактором является заряд ядра Z (собственно говоря, $Z_{эф}$), который благоприятствует в случае тяжёлых атомов появлению квадрупольных линий, а именно оказывается, что интенсивность квадрупольного излучения растёт пропорционально Z^3 , а дипольного — пропорционально Z^6 . Этим объясняется, почему некоторые переходы, запрещённые обычными правилами отбора для дипольного излучения, всё же наблюдаются у тяжёлых атомов²⁾, давая, впрочем, очень малую интенсивность. В случае γ -излучения ядер квадрупольные переходы могут иметь ту же вероятность, что и дипольные.

Иж) Условия наблюдаемости квадрупольного излучения. Следуя Боэну³⁾, представим интенсивность рассматриваемого излучения в следующей форме:

$$J = N h \nu \frac{A_1}{A_1 + A + B + C}, \quad (9)$$

где N — число атомов, достигающих начального состояния рассматриваемого процесса излучения в секунду; $h\nu$ — энергия элементарного акта излучения; A_1 — вероятность перехода для этого акта; A — вероятность всех других переходов, которые могут произойти спонтанно из заданного начального состояния; B — вероятность того, что вследствие соударений первого и второго рода с другими атомами или электронами светящегося газа атом будет удалён из начального состояния; C — вероятность поглощения световых квантов.

При процессах поглощения C и при соударениях первого рода атом переходит в более высокие энергетические состояния, при соударениях второго рода и при процессах A — в более низкие. Отношение $A_1 : (A_1 + A + B + C)$ равно числу случаев, благоприятствующих испусканию $h\nu$, делённому на число всех случаев.

Легко видеть, что если процесс A_1 относится к квадрупольному излучению, а в процессах A происходит дипольное излучение, то это отношение весьма близко к нулю, так как тогда A в знаменателе будет приблизительно в 10^6 раз больше, чем числитель A_1 . Но это означает: для того чтобы квадрупольное излучение было наблюдаемо, необходимо, чтобы начальное

¹⁾ E. U. Condon, *Astrophys. J.* **79**, 217 (1934).

²⁾ Особенно ср. систематические исследования E. Segré, *Acc. die Lincei* **14**, декабрь 1931; **16**, ноябрь 1932.

³⁾ J. S. Bowen, *Rev. Mod. Phys.* **8**, 55 (1933). Также и в предыдущих пунктах о фактическом материале по мультипольному излучению мы следовали этому авторитетному сообщению. Ср. также критические замечания по этому поводу D. H. Menzel, *Nature* **142**, 644 (1938).

состояние атома было метастабильным. Как мы видели в I_d , это условие было выполнено в рассмотренных астрофизических примерах.

Далее видно, что для наблюдаемости квадрупольного излучения необходимо, чтобы плотность светящихся атомов и одновременно плотность излучения были бы незначительными. В противном случае слагаемые B и C в знаменателе (7) весьма сильно ослабили бы интенсивность. Эти условия идеальным образом выполнены в планетарных туманностях (небулиевые линии), где среднее время между столкновениями частиц исчисляется приблизительно минутой, а плотность излучения равна приблизительно 10^{-6} части плотности излучения на поверхности солнца. Эти условия выполнены также и в самых верхних слоях земной атмосферы (линии северного сияния).

Из Эффект Зеемана квадрупольных линий. Ограничимся нормальным эффектом Зеемана, т. е. синглетными комбинациями. На рис. 56, а

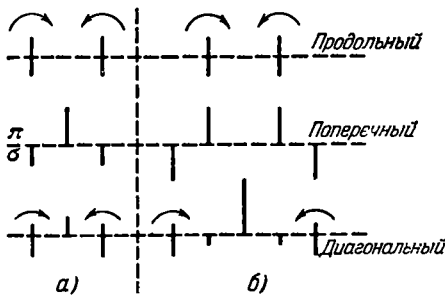


Рис. 56. а — дипольное излучение: π -компоненты вычерчены вверх от горизонтальных линий, σ -компоненты — вниз; полукруглые стрелки означают у верхней линии круговую, а у нижней — эллиптическую поляризацию; б — квадрупольное излучение: π -компоненты вычерчены вверх от горизонтальных линий, σ -компоненты — вниз; полукруглые стрелки означают у верхней линии круговую, а у нижней — эллиптическую поляризацию.

ное расщепление. Средняя компонента, которая должна быть на месте исходной нерасщепленной линии, являющаяся в случае дипольного излучения π -компонентой, в случае квадрупольного излучения отсутствует. На рисунках изображена также схема эффекта Зеемана при наблюдении под 45° к магнитным силовым линиям: средние компоненты в обоих случаях поляризованы как π -компоненты; в квадрупольном излучении σ -компоненты имеют нормальное расщепление, эллиптически поляризованные компоненты имеют в два раза большее расщепление, чем нормальное; в дипольном излучении эллиптически поляризованные компоненты имеют нормальное расщепление.

Этот эффект Зеемана квадрупольного излучения, теоретически предсказанный Рубиновичем, наблюдался во всех подробностях Фрерихсом и Кэмпбеллом¹⁾ на линиях северного сияния. Аномальный эффект Зеемана у щелочных элементов также может быть рассчитан теоретически и наблюдался на квадрупольной комбинации (sd) у калия²⁾.

¹⁾ R. Frerichs a. J. S. Campbell, Phys. Rev. 36, 151, 1460 (1930).

²⁾ E. Segré, Zs. f. Phys. 66, 827 (1930); E. Segré a. C. J. Bakker, там же 72, 724 (1931).

и) О наблюдаемости линии северного сияния в лаборатории. Экспериментальным осуществлением линии северного сияния мы обязаны классическому исследованию Макленана, Маклеода и Маккуори¹⁾. В качестве газа-наполнителя была использована смесь из небольшого количества кислорода и большого количества благородного газа. Известно, что минимальная энергия возбуждения благородного газа больше чем 10 в, а энергия возбуждения атома кислорода для начального состояния S-линии северного сияния составляет 5,3 в. Поэтому при столкновениях между атомами кислорода и атомами благородных газов энергия не может передаваться последним.

Следовательно, после столкновения атом кислорода, находящийся в состоянии, начальном для S-линии (удар первого рода), будет находиться в метастабильном состоянии, причём это состояние будет метастабильным не только относительно перехода на более низкие состояния атома кислорода, но и относительно ударов с атомами благородного газа; поэтому столкновение с атомами благородного газа будет происходить не как столкновения второго рода, а как упругое столкновение. С другой стороны, роль столкновений между атомами кислорода, которые могли бы привести к образованию молекул кислорода, сведена к минимуму благодаря незначительной концентрации кислорода и большой концентрации благородного газа. То обстоятельство, что канадские учёные в ходе своего исследования не смогли установить по эффекту Зеемана квадрупольную природу линии северного сияния, объясняется тем, что они в своих наблюдениях ограничились лишь продольным эффектом Зеемана²⁾, который, как это было установлено выше (рис. 5б), для квадрупольных и дипольных линий совпадает; кроме того, в то время ещё отсутствовала теория Рубиновича этого вопроса.

II. Теория мультипольного излучения

В этом втором разделе будут выведены главные результаты работ Рубиновича, создавшего основы теории³⁾. Некоторое упрощение по сравнению с этими работами будет достигнуто тем, что при расчёте излучения везде будет использовано волномеханическое выражение для плотности тока, согласно которому эта величина имеет периодическую зависимость от времени в виде $\exp(-i\omega t)$, в то время как в первоначальном полуклассическом расчёте излучения эта зависимость оставалась произвольной.

Иа) Различные составные части мультипольного излучения. Разложение второй составной части на электрическое квадрупольное и магнитное дипольное излучение. Исходим из представления поля, данного в (I.8.21):

$$E = \frac{i\omega}{c^2 R} e^{-i\omega \left(T - \frac{R}{c}\right)} \int \mathbf{j}_{\perp} e^{-\frac{i\omega}{c} (rn)} d\tau + \text{сопряжённое}, \quad H = [nE], \quad (1)$$

и разбиваем его при помощи разложения (I.8.22):

$$e^{-\frac{i\omega}{c} (rn)} = 1 - \frac{i\omega}{c} (rn) + \frac{1}{2} \left(\frac{i\omega}{c}\right)^2 (rn)^2 + \dots \quad (1a)$$

¹⁾ J. C. McLennan, J. H. McLeod, W. C. McQuarrie, Proc. Roy. Soc. 114, 1 (1927); см. также J. C. McLennan a. G. M. Shrum, там же 106, 138 (1924).

²⁾ J. C. McLennan, J. H. McLeod и R. Ruedy, Phil. Mag. 6, 558 (1928).

³⁾ Ср. итоговое изложение А. Rubinowicz u. J. Blaton, Die Quadrupol-Strahlung (Квадрупольное излучение) в Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften, Bd 11, Берлин, 1932.

Первый член, дающий дипольное излучение, преобразуется в обычный «матричный элемент первого порядка»:

$$M = \int p r d\tau. \quad (2)$$

Именно, на основании (1.8.16) имеем:

$$\int j_{\perp} d\tau = -i\omega M_{\perp},$$

где M_{\perp} — компонента матричного элемента M в направлении, перпендикулярном к направлению наблюдения n . Тогда на основании (1) и (1а) для дипольного излучения имеют место следующие равенства:

$$\left. \begin{matrix} E \\ H \end{matrix} \right\} = \frac{\omega^2}{c^2 R} \exp \left\{ -i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\} \left\{ \begin{matrix} M_{\perp} \\ [nM] \end{matrix} \right\} + \text{сопряжённое}. \quad (3)$$

Переходим ко второму члену разложения. Для него прежде всего на основании (1) и (1а) имеем:

$$E = \frac{\omega^2}{c^2 R} \exp \left\{ -i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\} \int j_{\perp}(rn) d\tau + \text{сопряжённое}. \quad (4)$$

Так как вектор n постоянен, то при интегрировании получим произведение (jr) , различные компоненты которого $j_i r_k$ образуют тензор второго ранга a_{ik} . Разложим этот тензор на симметричную и антисимметричную части, полагая

$$a_{ik} = j_i r_k = b_{ik} + c_{ik}, \quad \begin{cases} b_{ik} = \frac{1}{2}(j_i r_k + j_k r_i), \\ c_{ik} = \frac{1}{2}(j_i r_k - j_k r_i). \end{cases} \quad (5)$$

Как и в (1.8.20а), полагаем

$$j_{\perp} = j - (jn)n \quad (5a)$$

и разлагаем стоящий справа вектор на его компоненты по осям координат. Тогда i -я компонента подинтегрального выражения (4) будет равна

$$(j_i - (jn)n_i)(rn) = j_i r_k n_k - j_m n_m n_i r_k n_k, \quad (6)$$

причём в правой части знаки суммирования по k и m опущены.

Симметричная составная часть равна электрическому квадрупольному излучению. Мы получим симметричную часть излучения, если в правой части (6) $j_i r_k$ и $j_m r_k$ заменим через b_{ik} и соответственно b_{mk} и отбросим антисимметричную часть c_{ik} и соответственно c_{mk} в (5). Тогда из (6) получается:

$$b_{ik} n_k - b_{mk} n_m n_i n_k \quad (6a)$$

или, принимая во внимание значение b в (5),

$$\frac{1}{2}(j_i r_k n_k + j_k r_i n_k) - \frac{1}{2}(j_m r_k n_m n_i n_k + j_k r_m n_m n_i n_k). \quad (6b)$$

Члены, стоящие в скобках, можно объединить, если в первом члене выделить множитель $r_k n_k = (rn)$, а во втором — множитель $j_k n_k = (jn)$ и в оставшихся членах вернуться к прежнему способу написания $j_m n_m = (jn)$ и соответственно $r_m r_n = (rn)$. Результат гласит:

$$\frac{1}{2}(j_i - (jn)n_i)(rn) + \frac{1}{2}(r_i - (rn)n_i)(jn). \quad (6в)$$

Это преобразование справедливо при любом индексе l , следовательно, оно также справедливо, если отбросить индекс для соответствующей векторной величины. Используя равенство (5б) для j и также для r , вместо (6в) можно написать:

$$\frac{1}{2} \{j(rn) + r(jn)\}_{\perp}. \quad (6г)$$

Тогда подстановка этого выражения в (4) даёт в качестве симметричной части излучения выражение

$$E = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^3 R} \exp \left\{ -i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\} \int \{j(rn) + r(jn)\}_{\perp} d\tau + \text{сопряжённое}. \quad (7)$$

Антисимметричная часть равна магнитному дипольному излучению¹⁾. Эта составная часть получается подстановкой в (6) для $j_i r_k$ антисимметричной части c_{ik} и отбрасыванием симметричной части b_{ik} . Следовательно, вместо (6а) будем иметь:

$$c_{ik} n_k - c_{mk} n_m n_i n_k. \quad (8)$$

Но здесь второй член исчезает, так как при перемене местами значков суммирования m, k знак этого члена изменяется. Следовательно, выражение (8) сводится к первому члену и с учётом (5) гласит:

$$c_{ik} n_k = \frac{1}{2} (j_i r_k - r_i j_k) n_k. \quad (8а)$$

Так как для $l = k$ это выражение равно нулю, суммирование по k сводится к суммированию по значениям $l+1$ и $l-1$. Поэтому из (8а) получается:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \{ (j_i r_{i+1} - r_i j_{i+1}) n_{i+1} + (j_i r_{i-1} - r_i j_{i-1}) n_{i-1} \} = \\ = \frac{1}{2} \{ [jr]_{i-1} n_{i+1} + [rj]_{i+1} n_{i-1} \} = \frac{1}{2} [[rj] n]_i. \end{aligned} \quad (8б)$$

Полученный вектор, как и должно быть, перпендикулярен к n . Внося этот вектор в (4) вместо $j_{\perp}(rn)$, мы получим в качестве антисимметричной составной части излучения выражение:

$$E = -\frac{\omega^2}{c^3 R} \exp \left\{ -i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\} [n \mathfrak{M}] + \text{сопряжённое}, \quad (9)$$

где введено обозначение

$$\mathfrak{M} = \int \frac{1}{2} [rj] d\tau. \quad (9а)$$

Выпишем также напряжённость магнитного поля этого излучения. В этом случае в (1) появляется произведение

$$[n [n \mathfrak{M}]] = - \{ \mathfrak{M} - n (n \mathfrak{M}) \} = - \mathfrak{M}_{\perp}.$$

Вследствие этого будем иметь:

$$H = \frac{\omega^2}{c^3 R} \exp \left\{ -i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right\} \mathfrak{M}_{\perp} + \text{сопряжённое}. \quad (9б)$$

Сравнивая выражения (9), (9а, б) с ранее полученными выражениями (2), (3) для дипольного излучения и отвлекаясь от множителя $1/c$, замечаем

¹⁾ Различие между электрическим и магнитным мультипольным излучением было впервые обосновано в диссертации Бринкмана, см. ниже примечание на стр. 623.

следующее:

$$\begin{aligned} & \text{новые } H, E, \mathfrak{M} \\ & \text{соответствуют прежним}^1) E, -H, M. \end{aligned} \quad (10)$$

Это соответствие показывает, что процесс излучения, обсуждаемый сейчас, следует рассматривать как магнитное дипольное излучение. Действительно, на основании известной формулы электродинамики \mathfrak{M} (9а) означает магнитный момент распределенных токов j точно так же, как матричный элемент M означает электрический момент распределённых зарядов.

И6) Представление квадрупольного излучения через матричные элементы. Возвратимся к электрическому квадрупольному излучению и покажем, что оно может быть представлено матричными элементами второго порядка распределённой плотности ρ . Тем самым будет обосновано и его название как электрического квадрупольного излучения.

Будем исходить из равенства (7) и преобразуем входящий в это равенство интеграл

$$\int \{j(rn) + r(jn)\}_{\perp} d\tau. \quad (11)$$

При этом будем опираться на уравнение непрерывности в форме (14), стр. 57:

$$\operatorname{div} j = +i\omega\rho. \quad (12)$$

Умножим обе части этого равенства на компоненту тензора второго порядка $r_i r_k$ и проинтегрируем по $d\tau$. Справа получим:

$$i\omega M_{ik}, \quad M_{ik} = \int \rho r_i r_k d\tau, \quad (13)$$

где M_{ik} — компонента тензора, который следует классифицировать как «квадрупольный момент электрической распределённой плотности».

Слева, интегрируя дважды по частям (положив, например, $r_i = x$, $r_k = y$), будем иметь:

$$\int \operatorname{div} j r_i r_k d\tau = - \int j_i r_k d\tau - \int j_k r_i d\tau. \quad (14)$$

Теперь, чтобы получить выражение (11), умножим правую часть (14) на n_k (под знаком интеграла, так как n_k постоянна) и просуммируем по $k = 1, 2, 3$. Тогда получится:

$$- \left\{ \int j(rn) d\tau + \int r(jn) d\tau \right\}_i. \quad (15)$$

Тот же прием, применённый к (13), даёт:

$$\sum n_k M_{ik} = \int \rho r_i(rn) d\tau. \quad (16)$$

По уравнению непрерывности (12) оба выражения (15) и (16) равны друг другу. Отсюда, конкретизируя индекс i направлением \perp , на основании (7) и второго уравнения (1) получим:

$$\left. \begin{matrix} E \\ H \end{matrix} \right\} = \frac{-i\omega^3}{2c^3} \frac{1}{R} \exp \left[-i\omega \left(T - \frac{R}{c} \right) \right] \left\{ \begin{matrix} \int \rho r_{\perp}(nr) d\tau \\ \int \rho nr d\tau \end{matrix} \right. + \text{сопряжённое}. \quad (17)$$

¹⁾ Отрицательный знак у H зависит от того, что последовательность E, H, n в процессе излучения образует всегда правую систему, следовательно, теперь последовательность векторов H, E, n образует левую систему.

Тензор M_{ik} представляет всю совокупность электрических квадрупольных моментов; так же как вектор M_i , равенство (2) содержит в себе все возможные дипольные моменты. Поэтому, действительно, излучение, даваемое формулой (17), следует называть электрическим квадрупольным излучением. Мы не будем анализировать излучение, соответствующее следующему члену в разложении (1а), так как не известны достоверные примеры применения этому; заметим лишь, что это излучение складывается из электрического октупольного излучения и магнитного квадрупольного.

Ив) Правила отбора для квадрупольного излучения в случае одного оптического электрона. Начальное и соответственно конечное состояния перехода описываем с помощью волновых функций:

$$\psi_n = \dots P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad \psi_{n'} = \dots P_{l'}^{m'}(\cos \vartheta) e^{im'\varphi}, \quad (18)$$

опуская несущественные здесь радиальные части этих функций. Из плотности перехода

$$\rho = e\psi_n^*\psi_{n'} \quad (18a)$$

получается тензор M_{ik} [равенство (13)] путём перемножения с квадратичной (шестичленной) координатной матрицей $r_i r_k$. Сгруппируем компоненты последней более удобным образом в следующие три пары:

$$a) z^2 = r^2 \cos^2 \vartheta, \quad x^2 + y^2 = r^2 \sin^2 \vartheta,$$

$$b) z(x \pm iy) = r^2 \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi},$$

$$в) (x \pm iy)^2 = r^2 \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}.$$

Очевидно, что из этих пар можно линейно составить все произведения $r_i r_k$, в том числе также содержащиеся и в (17). Имея в виду, что положение осей x, y, z в пространстве произвольно, нам необходимо при выводе правил отбора исследовать не только произведения $r_i r_k$, содержащиеся в (17), но и все возможные произведения, т. е. необходимо исследовать все три пары а), б), в). Прежде всего исследуем:

Правила отбора для квантового числа m . В этом случае необходимо обратить внимание лишь на зависимость функций от φ . Поэтому, кроме зависимости функций ψ_n и $\psi_{n'}$ от r , можно опустить также зависимость от ϑ . Для всех трёх пар а), б), в) взятые по φ интегралы квадратичных матричных элементов записываются в виде:

$$\left. \begin{array}{l} a) \\ б) \\ в) \end{array} \right\} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ e^{\pm i\varphi} \\ e^{\pm 2i\varphi} \end{array} \right\} d\varphi.$$

Отсюда получается вывод: интеграл всегда исчезает, за исключением случаев:

$$m' = m, \quad (19a)$$

$$m' = m \pm 1, \quad (19б)$$

$$m' = m \pm 2. \quad (19в)$$

Это есть часть правила отбора (2), которое было дано в начале этого дополнения. Для всех других значений (m', m) имеет место запрет комбинации.

Правила отбора для азимутального квантового числа. Все три случая а), б), в) необходимо рассматривать обособленно. В случае а) имеем $m' = m$ и интеграл, взятый по ϑ , будет иметь вид:

$$\text{а) } \int_0^\pi P_l^m P_l^m \begin{Bmatrix} \cos^2 \vartheta \\ \sin^2 \vartheta \end{Bmatrix} \sin \vartheta d\vartheta;$$

в случае б) имеем $m' = m \pm 1$ и интеграл запишется в виде:

$$\text{б) } \int_0^\pi P_l^m P_l^{m \pm 1} \cos \vartheta \sin \vartheta \sin \vartheta d\vartheta;$$

в случае в) имеем $m' = m \pm 2$ и поэтому запишем:

$$\text{в) } \int_0^\pi P_l^m P_l^{m \pm 2} \sin^3 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta.$$

Для вычисления этих интегралов необходимы те же рекуррентные формулы дополнения 6, равенства (8), (7б) и (8а) для сферических функций, которые используются также для получения правил отбора для дипольного излучения, а именно:

$$\text{(А) } (2l+1) \cos \vartheta P_l^m = (l-m+1) P_{l+1}^m + (l+m) P_{l-1}^m,$$

$$\text{(Б) } (2l+1) \sin \vartheta P_l^m = P_{l+1}^{m+1} - P_{l-1}^{m+1},$$

$$\text{(В) } (2l+1) \sin \vartheta P_l^m = (l+m)(l+m-1) P_{l-1}^{m-1} - (l-m+1)(l-m+2) P_{l+1}^{m-1}.$$

Интеграл а) с множителем $\cos^2 \vartheta$. Умножаем (А) на $\cos \vartheta$ и к получающимся справа произведениям $\cos \vartheta P_{l+1}^m$ ещё раз применяем формулу (А). Тогда получится равенство вида:

$$\cos^2 \vartheta P_l^m = a P_{l+2}^m + b P_l^m + c P_{l-2}^m \quad (20)$$

с рациональными коэффициентами a, b, c . Умножение этого равенства на $P_{l'}^m$ и интегрирование по $\sin \vartheta d\vartheta$ вследствие ортогональности P дают правило отбора:

$$l' = l+2, \quad l' = l, \quad l' = l-2. \quad (21)$$

При всех других значениях l' интеграл исчезает, следовательно, соответствующие комбинации l, l' запрещены.

То же самое правило справедливо и для интеграла а) с множителем $\sin^2 \vartheta = 1 - \cos^2 \vartheta$, при этом член с множителем 1 ведёт к уже имеющемуся в (21) правилу $l = l'$.

Интеграл б) с верхним индексом $m+1$. Умножаем (Б) на $\cos \vartheta$ и к произведениям в правой части применяем рекуррентную формулу (А). Справа получается выражение вида:

$$a P_{l+2}^{m+1} + b P_l^{m+1} + c P_{l-2}^{m+1},$$

где a, b, c — рациональные коэффициенты, но отличные от коэффициентов в (20). Интегрирование по $\sin \vartheta d\vartheta$ снова приводит к правилам отбора (21). То же самое имеет место и в случае интеграла б) с верхним индексом $m-1$, необходимо лишь вместо (Б) использовать рекуррентную формулу (В).

В случае интеграла в) с верхним индексом $m + 2$, соответственно $m - 2$, необходимо два раза применить рекуррентную формулу (Б), соответственно (В), после чего опять придём к правилу отбора (21).

Правило отбора (21) совпадает с первым правилом отбора (2), приведённым в начале настоящего дополнения.

Приведённые вычисления позволяют пойти дальше простого обоснования правил отбора; именно, с помощью введённых в (20) и аналогичных коэффициентов а), б), в) они позволяют произвести количественный расчёт интенсивности квадрупольного излучения. Здесь мы не будем заниматься этими расчётами.

Иг) Общие правила отбора для квадрупольного излучения. Из пояснений в гл. IX, § 6, особенно в связи с уравнением (4), следует, что собственные функции (18) будут чётными или нечётными функциями координат в зависимости от того, будет ли l (соответственно l') чётным или нечётным.

В квадратичном тензоре M произведение этих собственных функций умножается на чётную функцию, именно на произведение двух координат, и интегрируется по всему конфигурационному пространству. Тензор M обращается в нуль при комбинации чётной и нечётной собственной функции, или другими словами: при квадрупольном излучении комбинировать могут лишь чётные с чётными или нечётные с нечётными собственными функциями (термами). При электрическом дипольном излучении имеет место обратное: комбинировать могут лишь чётные с нечётными термами. Действительно, в этом случае вместо квадратичного тензора M мы имеем линейный, следовательно, нечётный координатный вектор x, y, z .

Отсюда очевидно, что приведённое выше правило отбора (21) является формулировкой правила Лапорта для квадрупольного излучения; то же самое можно сказать и о правиле $l' = l \pm 1$ в правиле Лапорта для дипольного излучения.

Теперь легко осуществляется переход к общим правилам отбора в случае произвольной атомарной электронной системы. В этом случае собственные функции, если отвлечься от спина, также распадаются на два класса: чётные и нечётные. При электрическом квадрупольном излучении между собой могут комбинироваться лишь чётные функции с чётными функциями или нечётные функции с нечётными функциями, при дипольном излучении — лишь чётные с нечётными.

Таково значение общего правила отбора из 1б). Так как мы не собираемся касаться здесь вопроса о спине электрона (ограничиваясь синглетными системами), то мы должны отказаться от вывода дополнительных правил отбора для квантового числа J и особых правил для случая связи Ресселл — Саундерса [ср. 1в)].

Ид) Правила отбора для магнитного дипольного излучения, в частности при одном оптическом электроном. Согласно (9) и (9а) магнитное дипольное излучение определяется, исходя из магнитного момента \mathfrak{M} тока перехода. На основании представления тока в (I. 7.15) и собственных функций (18), дополненных их радиальными частями после элементарного вычисления, получим для \mathfrak{M} следующие выражения (обозначая массу электрона через μ):

$$а) \mathfrak{M}_z = \frac{eh}{2\mu} (m + m') \int R_{nl} R_{n'l'} P_l^m P_{l'}^m e^{i(m-m')\varphi} d\tau,$$

$$б) \mathfrak{M}_x \pm i\mathfrak{M}_y = -\frac{eh}{2\mu} \int R_{nl} R_{n'l'} \left\{ \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} e^{\pm i\varphi + i(m-m')\varphi} d\tau,$$

где множитель, заключённый в последней строке в фигурные скобки, равен

$$(m + m') \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} P_l^m P_l^{m'} \pm \left[P_l^m \frac{dP_l^{m'}}{d\vartheta} - P_l^{m'} \frac{dP_l^m}{d\vartheta} \right].$$

На основании равенства (9а) в дополнении 6 этот множитель можно записать в следующей более удобной форме:

$$в) 2 \left\{ \frac{m'}{m} \right\} \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} P_l^m P_l^{m'} \mp P_l^m P_l^{m'+1} \pm P_l^{m'} P_l^{m+1}.$$

В случае а) из условий ортогональности угловой части, с одной стороны, и радиальной части, с другой, заключаем, что \mathcal{M}_z только тогда отлично от нуля, когда одновременно выполняются условия:

$$\Delta m = m - m' = 0, \quad \Delta l = l - l' = 0, \quad \Delta n = n - n' = 0, \quad (22)$$

т. е. когда начальное и конечное состояния совпадают. Но это означает, что не происходит никакого изменения состояния и поэтому нет никакого излучения.

В случае б) интегрирование по φ даёт правила отбора:

$$\Delta m = m - m' = \mp 1, \quad m' = m \pm 1. \quad (23)$$

Если мы подставим это значение в в) и выберем верхний знак, следовательно, также и множитель $m' = m + 1$ в в), то получим:

$$в_1) = \left[2(m + 1) \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} P_l^{m+1} - P_l^{m+2} \right] P_l^m + P_l^{m+1} P_l^{m+1}.$$

Опираясь на дополнение 6, равенство (9б), это выражение можно записать также в виде:

$$в_2) = (l' + m + 1)(l' - m) P_l^m P_l^m + P_l^{m+1} P_l^{m+1}.$$

Выбирая, с другой стороны, нижний знак, следовательно, также и множитель $m' = m - 1$ в в), получаем то же самое выражение $в_2)$, но с m' вместо m и l' вместо l .

Легко заметить что предписанное в б) интегрирование вследствие ортогональности P и R даёт нуль, за исключением случая, когда

$$\Delta l = l - l' = 0 \quad \text{и также} \quad \Delta n = n - n' = 0.$$

Таким образом, мы приходим к тому же результату, что и в случае а), а именно, что в одноэлектронной задаче магнитное дипольное излучение невозможно. То же самое имеет место в случае чистой связи Ресселл — Саундерса. Лишь при нарушении этого ($L - S$ -связь) наряду с электрическим квадрупольным излучением появляется также магнитное дипольное излучение. Последнее было показано в [д] на примере небулиевых линий.

Ие) Соотношение интенсивностей дипольного и квадрупольного излучения. Сравнение (17) и (3) показывает, что поле квадрупольного излучения получается из поля дипольного излучения путём умножения последнего (под знаком интеграла) на

$$-\frac{l\omega}{2c}(rn).$$

Учитывая, что собственные функции при интегрировании дают заметный вклад в значение интеграла лишь в пределах атомной области a , получаем, что отношение напряжённостей полей обоих типов излучений будет по по-

рядку величины равно

$$\frac{\omega}{2c} a = \pi \frac{a}{\lambda}.$$

Поэтому для отношения интенсивностей будем иметь:

$$\frac{J_{\text{квядр}}}{J_{\text{дип}}} = \pi^2 \frac{a^2}{\lambda^2}. \quad (24)$$

Отсюда при $a = 10^{-8}$ и $\lambda = 4 \cdot 10^{-5}$ получается указанный в Ie) порядок величины 10^{-6} . Тот же самый порядок величины получается при аналогичной грубой оценке отношения интенсивностей октупольного и квадрупольного излучений.

Для того чтобы иметь возможность оценить отношение интенсивностей магнитного дипольного и электрического квадрупольного излучений, необходимо сравнить выражение (96) с (17). При этом порядок величины магнитного момента \mathcal{M} в (96) берётся из а) в IIд). Тогда найдём:

$$\frac{J_{\mathcal{M} \text{ дип}}}{J_{E \text{ квад}}}} = \frac{m_B \lambda}{ea a}, \quad (25)$$

где m_B — магнетон Бора для атома $\sim 0,8 \cdot 10^{-20}$, имеющий размерность заряда (электрического), умноженного на *см*. Если для λ и a взять прежние значения, то отношение в (25) будет приблизительно равно 7. Отсюда видно, что магнитное дипольное излучение, если только оно имеет место по условиям связи, может по интенсивности превзойти электрическое квадрупольное излучение, как это утверждалось в Ie) в случае небулиевых линий.

IIж) Эффект Зеемана в мультипольном излучении. Ограничимся нормальным¹⁾ эффектом Зеемана (синглетные линии) и электрическим мультипольным излучением. Расщепление линии, как указано в (II. 6.13а), зависит только от изменения Δm магнитного квантового числа m . Уже отсюда следует, что число, вообще говоря, возможных компонент Зеемана возрастает вместе со степенью мультипольности. В соответствии с правилами отбора (1), (2), (2а) мы имеем при дипольном, квадрупольном, октупольном, ... излучении соответственно 3, 5, 7, ... эквидистантных (равноотстоящих) компонент Зеемана. Однако полное число этих компонент будет проявляться лишь при наблюдении в перпендикулярном направлении; в этом случае компоненты разделяются на чередующиеся между собой линейно поляризованные π - и σ -компоненты (ср. рис. 56, б или схему на стр. 625). При наблюдении в продольном направлении проявляются лишь два известных из дипольного излучения колебания $\Delta m = \pm 1$. При наблюдении в диагональном направлении проявляются смешанные π - и σ -компоненты, следовательно, имеет место эллиптическая поляризация. Относительно магнитного мультипольного излучения достаточно сказать только, что в этом случае роль π - и σ -компонент меняется по сравнению с их ролью в электрическом мультипольном излучении в соответствии с принципом замещения, содержащимся в (10).

Формально доказательство этих утверждений упрощается тем обстоятельством, что при исследовании поляризации достаточно принять во внимание зависимость собственных функций только от φ . Их зависимость от θ

¹⁾ Относительно роли спина при мультипольном излучении ср. H. C. Brinkman, *Physica*, 1, 97 (1933) and *Diss. Utrecht*, 1932.

и r только тогда существенна, когда нас интересует относительная интенсивность компонент Зеемана.

Направим ось z вдоль магнитного поля и обозначим через ϑ и φ полярные углы. Радиус-вектор точки интегрирования тогда будет иметь составляющие:

$$r = r(\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta). \quad (26)$$

Пусть (бесконечно удалённая) точка наблюдения P имеет углы Θ и $\Phi = 0$. В точке P построим координатный триэдр n, p, s . Как и раньше, n является единичным вектором в направлении излучения $O \rightarrow P$, p и s соответствуют единичным векторам $-e_\vartheta$, $-e_\varphi$, введённым на стр. 432. Единичный вектор p лежит в меридиональной плоскости, проходящей через точку P , s направлен перпендикулярно к этой плоскости. Переход от x, y, z к n, p, s даётся следующей схемой преобразования, которую следует сравнить со схемой (30) на стр. 433:

	x	y	z	
n	$\sin \Theta$	0	$\cos \Theta$	(27)
p	$-\cos \Theta$	0	$\sin \Theta$	
s	0	-1	0	

Из (26) и (27) следует:

$$\left. \begin{aligned} (rn) &= r(\sin \vartheta \sin \Theta \cos \varphi + \cos \vartheta \cos \Theta), \\ (rp) &= r(-\sin \vartheta \cos \Theta \cos \varphi + \cos \vartheta \sin \Theta), \\ (rs) &= -r \sin \vartheta \sin \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Произведение (rn) представляет собой характерный множитель, который появляется в электрическом квадрупольном излучении [равенство (17)] в первой степени, в октупольном излучении — во второй и в дипольном излучении — в нулевой. Наряду с этим во всех типах излучений выступает общий им всем множитель

$$r_\perp = (rp)p + (rs)s. \quad (29)$$

Нас интересует главным образом квадрупольное излучение. Образует на основании (28) и (29) для наблюдения в поперечном и продольном направлении ($\Theta = \frac{\pi}{2}$ и соответственно $\Theta = 0$) выражение

$$r_\perp (rn) = \begin{cases} r^2(\cos \vartheta \cos \varphi p - \sin \vartheta \sin \varphi \cos \varphi s), & \text{поперечное,} \\ r^2 \sin \vartheta \cos \vartheta (\cos \varphi p - \sin \varphi s), & \text{продольное.} \end{cases} \quad (30)$$

Входящие в эти выражения функции от φ выразим в форме:

$$\left. \begin{aligned} \cos \varphi p &= \frac{p}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), \quad \sin \varphi \cos \varphi s = -\frac{is}{4}(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}), \\ \cos \varphi p - \sin \varphi s &= \frac{1}{2}(p + is)e^{i\varphi} + \frac{1}{2}(p - is)e^{-i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (30a)$$

Как видно из (17), эти выражения необходимо умножить на плотность ρ . Беря собственные функции в форме (18) и учитывая правило отбора (19а, б, в) для квадрупольного излучения:

$$\Delta m = -2, -1, 0, +1, +2, \quad (31)$$

мы получаем зависимость плотности ρ от φ в виде:

$$e^{i\Delta m \varphi} = e^{-2i\varphi}, e^{-i\varphi}, 1, e^{+i\varphi}, e^{+2i\varphi}. \quad (31a)$$

При перемножении между собой (31a) и (30) и интегрировании по φ от 0 до 2π выпадут все члены, в которых экспоненциальные функции не компенсируют друг друга. Характер поляризации, даваемый оставшимися после интегрирования членами, написан в двух первых строках следующей таблицы:

$\Delta m =$	Квадрупольное излучение				
	-2	-1	0	+1	+2
Поперечное .	s	p	*	p	s
Продольное .	*	$p+is$	*	$p-is$	*
Диагональное	$\frac{p}{\sqrt{2}} + is$	s	p	s	$\frac{p}{\sqrt{2}} - is$

Третья строчка представляет случай $\Theta = \frac{\pi}{4}$. В этом случае вместо (30) легко получается:

$$r_{\perp}(rn) = \frac{r^2}{2} [(-\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + \cos^2 \vartheta) p - \sqrt{2} \sin \vartheta \sin \varphi (\sin \vartheta \cos \varphi + \cos \vartheta) s]. \quad (32)$$

Чтобы проверить третью строчку таблицы, необходимо лишь, как и в (30a), зависимость от φ в (32) представить в экспоненциальной форме и сравнить с (31a).

Для сравнения вычислим соответствующую таблицу для дипольного излучения, которую легко, очевидно, получить тем же путём [опуская множитель (rn)] на основании (29).

Сравнение обеих таблиц показывает: в продольном эффекте дипольное и квадрупольное излучения ведут себя одинаково; оба дают на нормальном лоренцевом расстоянии от середины пары линий, поляризованных в противоположных направлениях по кругу. (Ср. это со сказанным в Iи) относительно линий северного сияния.)

В поперечном эффекте π - и σ -компоненты меняются местами, однако таким образом, что средние компоненты при квадрупольном излучении отпадают. При наблюдении в диагональном направлении обе самые крайние компоненты поляризованы эллиптически с преобладанием σ -компоненты. Таким образом, рис. 5б, a и b полностью подтверждены приведёнными простыми вычислениями.

$\Delta m =$	Дипольное излучение		
	-1	0	+1
Поперечное . .	s	p	s
Продольное . .	$p+is$	*	$p-is$
Диагональное .	$\frac{p}{\sqrt{2}} - is$	p	$\frac{p}{\sqrt{2}} + is$

6. РЕКУРРЕНТНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ СФЕРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ И ИМ РОДСТВЕННЫХ

К гл. I, § 9 и гл. IX, § 4

Сферические функции были введены Лежандром и Лапласом в теории потенциала на основе «производящей функции»:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2ax+a^2}} = \sum \alpha^l P_l(x), \quad x = \cos \vartheta. \quad (1)$$

Как известно, мы приходим к этому ряду, разлагая величину, обратную

расстоянию между двумя точками, по степеням α :

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1r_2 \cos \vartheta + r_2^2}} = \begin{cases} \frac{1}{r_2} (1 - 2\alpha x + \alpha^2)^{-1/2}, & \alpha = \frac{r_1}{r_2} < 1, \\ \frac{1}{r_1} (1 - 2\alpha x + \alpha^2)^{-1/2}, & \alpha = \frac{r_2}{r_1} < 1. \end{cases} \quad (2)$$

Так как $\alpha = \frac{1}{r_{12}}$ удовлетворяет уравнению потенциала $\Delta \alpha = 0$, то коэффициенты при α должны удовлетворять дифференциальному уравнению (1.3.16) с $\lambda = l(l+1)$ и $m = 0$; они являются, следовательно, сферическими функциями $P_l(x)$; при этом условие $P_l(1) = 1$ удовлетворяется автоматически.

Из (1) посредством логарифмического дифференцирования по α и умножения на общий знаменатель следует:

$$(x - \alpha) \sum \alpha^l P_l = (1 - 2\alpha x + \alpha^2) \sum l \alpha^{l-1} P_l. \quad (3)$$

Сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях α^l в обеих частях равенства, получим:

$$xP_l - P_{l-1} = (l+1)P_{l+1} - 2x l P_l + (l-1)P_{l-1},$$

т. е.

$$(l+1)P_{l+1} - (2l+1)xP_l + lP_{l-1} = 0. \quad (4)$$

Последнее равенство является рекуррентной формулой *зональных* сферических функций.

Дифференциальные рекуррентные формулы этих функций легко найти, исходя из их представления (1.3.13):

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (x^2 - 1)^l}{dx^l},$$

а именно:

$$\frac{d}{dx} (P_{l+1} - P_{l-1}) = (2l+1)P_l, \quad (5)$$

$$\frac{d}{dx} P_{l+1} - x \frac{d}{dx} P_l = (l+1)P_l. \quad (5a)$$

Рекуррентные формулы для *присоединённых* сферических функций мы выведем, исходя из (4) и (5). Для этого дифференцируем формулу (4) m раз и умножаем на $\sin^m \vartheta$. Принимая во внимание, что

$$\frac{d^m}{dx^m} (xP_l) = x \frac{d^m P_l}{dx^m} + m \frac{d^{m-1} P_l}{dx^{m-1}},$$

а также определение

$$P_l^m = \sin^m \vartheta \frac{d^m P_l}{dx^m}, \quad (6)$$

получаем:

$$(l+1)P_{l+1}^m - (2l+1)xP_l^m - m(2l+1)\sin \vartheta P_l^{m-1} + lP_{l-1}^m = 0. \quad (7)$$

С другой стороны, из (5) путём $(m-1)$ -кратного дифференцирования по x и умножения на $\sin^m \vartheta$ получается:

$$P_{l+1}^m - P_{l-1}^m = (2l+1)\sin \vartheta P_l^{m-1}. \quad (7a)$$

Замена m на $m+1$ даёт:

$$(2l+1)\sin \vartheta P_l^m = P_{l+1}^{m+1} - P_{l-1}^{m+1}. \quad (7b)$$

Из (7) и (7а) функцию P_i^{m-1} можно исключить; результат исключения запишется в следующей форме:

$$(2l+1)xP_i^m = (l-m+1)P_{i+1}^m + (l+m)P_{i-1}^m. \quad (8)$$

Далее из (7б) легко находим, если заменим m через $-m$ и применим равенство (1.3.16ж):

$$(2l+1)\sin\theta P_i^m = (l+m)(l+m-1)P_{i-1}^{m-1} - (l-m+1)(l-m+2)P_{i+1}^{m-1}. \quad (8a)$$

Выпишем также дифференциальную рекуррентную формулу:

$$(1-x^2)\frac{d}{dx}P_i^m = (l+1)xP_i^m - (l-m+1)P_{i+1}^m. \quad (9)$$

Она получается способом, совершенно аналогичным применённому при выводе (7а). Дифференцируем m раз дифференциальное уравнение (1.3.14) для P_i , с одной стороны, и рекуррентную формулу (5а), с другой, исключаем из обоих равенств P_i^{m-1} и, наконец, умножаем на $\sin^m\theta$.

Другая дифференциальная рекуррентная формула следует прямо из (6) посредством дифференцирования по θ :

$$\frac{d}{d\theta}P_i^m = m\sin^{m-1}\theta \cos\theta \frac{d^m P_i}{dx^m} + \sin^m\theta \frac{d^{m+1}P_i}{dx^{m+1}} (-\sin\theta).$$

Применив снова (6), эту формулу можно записать в виде:

$$\frac{d}{d\theta}P_i^m = m \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_i^m - P_i^{m+1}. \quad (9a)$$

Рекуррентная формула, которая была использована в дополнении 5 при рассмотрении дипольного излучения, именно:

$$2(m+1)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}P_i^{m+1} = (l+m+1)(l-m)P_i^m + P_i^{m+2}, \quad (9б)$$

легко может быть проверена по следующей схеме:

$$2(m+1)(8)_{m+1} - (8a)_{m+2} + (l+m+1)(l-m)(7a)_{m+1} = 0,$$

что означает, что равенства (8), (8а), (7а) надо выписать соответственно с $m = m+1$, $m+2$, $m+1$ и умножить соответственно на множители $2(m+1)$, -1 , $(l+m+1)(l-m)$. При суммировании большинство членов уничтожается и получается формула (9б).

Исходя из (8) и (7б), можно вычислить интегралы J и K , к которым мы пришли при нахождении матричных элементов ротатора [уравнение (37), стр. 67]. Умножим (8) на P_i^m , (7б) на P_i^{m+1} и проинтегрируем в обоих случаях по x от -1 до $+1$. Это даёт:

$$(2l+1)J = (l-m+1) \int P_{i+1}^m P_i^m dx + (l+m) \int P_{i-1}^m P_i^m dx, \quad (10)$$

$$(2l+1)K = \int P_{i+1}^{m+1} P_i^{m+1} dx - \int P_{i-1}^{m+1} P_i^{m+1} dx. \quad (10a)$$

Эти равенства непосредственно показывают, что J и K вследствие ортогональности сферических функций всегда равны нулю, за исключением случаев $l = l \pm 1$.

Для случая $l' = l + 1$ вследствие условия нормировки (30), стр. 65, получается [вторые члены справа в (10) и (10а) пропадают]:

$$J = \frac{2}{(2l+1)(2l+3)} \frac{(l+m+1)!}{(l-m)!}, \quad K = \frac{2}{(2l+1)(2l+3)} \frac{(l+m+2)!}{(l-m)!}. \quad (11)$$

Соответственно для случая $l' = l - 1$ имеем [пропадают первые члены в (10) и (10а)]:

$$J = \frac{2}{(2l-1)(2l+1)} \frac{(l+m)!}{(l-m-1)!}, \quad K = \frac{-2}{(2l-1)(2l+1)} \frac{(l+m)!}{(l-m-2)!}. \quad (11a)$$

Величины (11) и (11а) для J и K , выписанные более подробно, означают:

$$\left. \begin{aligned} J(l, m \rightleftharpoons l+1, m) & \text{ соответственно } J(l, m \rightleftharpoons l-1, m), \\ K(l, m \rightleftharpoons l+1, m+1) & \text{ соответственно } K(l, m \rightleftharpoons l-1, m+1). \end{aligned} \right\} \quad (116)$$

На стр. 67 были использованы также величины

$$K(l, m \rightleftharpoons l+1, m-1) \text{ соответственно } K(l, m \rightleftharpoons l-1, m-1).$$

Вторая из них получается по схеме (116) и (11), если там l, m заменить через $l-1, m-1$; первая, — если в (11а) l, m заменить через $l+1, m-1$. Следовательно,

$$K(l, m \rightleftharpoons l+1, m-1) = \frac{2}{(2l+1)(2l+3)} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad (12a)$$

$$K(l, m \rightleftharpoons l-1, m-1) = \frac{-2}{(2l-1)(2l+1)} \frac{(l+m)!}{(l-m-2)!}. \quad (126)$$

Теперь можно выписать матричные элементы равенства (36), стр. 67. Мы имеем, понимая значение J в смысле (116):

$$\zeta_{i, i-1} = 2\pi a N_{i, m} N_{i-1, m} J(l, m \rightleftharpoons l-1, m).$$

Отсюда на основании первого равенства (10а), принимая во внимание значение $N_{i, m}$ из равенства (31), стр. 66, получается:

$$\zeta_{i, i-1} = a \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \quad (13)$$

и соответствующее выражение для $\zeta_{i, i+1}$ (замена l через $l+1$).

Далее, мы имеем на основании равенства (36), стр. 67:

$$(\xi \pm j\eta)_{i, i-1} = 2\pi a N_{i, m} N_{i-1, m \pm 1} K(l, m \rightleftharpoons l-1, m \pm 1).$$

Отсюда на основании второго равенства (11а), соответственно (12а), следует:

$$(\xi \pm j\eta)_{i, i-1} = \mp a \sqrt{\frac{(l \mp m)(l \mp m - 1)}{(2l-1)(2l+1)}}. \quad (14)$$

Значения $\xi \pm j\eta$ при переходе $l, l+1$ получаются из (14) заменой l на $l+1$.

Теперь используем рекуррентную формулу (8) для вычисления интегралов

$$X = \int_{-1}^{+1} (xP_l^m)^2 dx, \quad Y = \int_{-1}^{+1} xP_l^m P_{l+1}^m dx, \quad (15)$$

которые служили для доказательства теоремы о суммах_i на стр. 317. На основании (8) имеем:

$$X = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1}^m + \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1}^m \right)^2 dx.$$

Отсюда при учёте ортогональности и нормировки сферических функций следует:

$$X = \left(\frac{l-m+1}{2l+1} \right)^2 \frac{2}{2l+3} \frac{(l+1+m)!}{(l+1-m)!} + \left(\frac{l+m}{2l+1} \right)^2 \frac{2}{2l-1} \frac{(l-1+m)!}{(l-1-m)!}.$$

Это выражение можно преобразовать к виду:

$$X = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \left\{ \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)} \right\}. \quad (15a)$$

Аналогично из (8) следует:

$$Y = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1}^m + \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1}^m \right) P_{l+1}^m dx = \frac{l-m+1}{2l+1} \frac{2}{2l+3} \frac{(l+m+1)!}{(l-m+1)!}$$

или

$$Y = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{l+m+1}{2l+3}. \quad (15b)$$

Третий интеграл, именно:

$$Z = \int_{-1}^{+1} (1-x^2) P_{l+1}^m \frac{d}{dx} P_l^m dx,$$

на основании дифференциальной рекуррентной формулы (9) сводится к

$$Z = Y - \frac{2}{2l+3} \frac{(l+1+m)!}{(l-m)!},$$

что преобразуется к виду:

$$Z = -\frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{l(l+m+1)}{2l+3}. \quad (15b)$$

Наряду с собственно сферическими функциями P_l нам потребуются в гл. IX, § 4 при анализе задачи о двух центрах молекулы водорода так называемые сферические функции *второго рода* $Q_l(x)$. Они удовлетворяют тому же дифференциальному уравнению, что и $P_l(x)$, но не являются полиномами, а являются трансцендентными функциями логарифмического характера, которые в точках $x = \pm 1$ имеют особенности. Проще всего они определяются посредством производящей функции, именно как коэффициенты следующего разложения по P_l^1):

$$\frac{1}{x-y} = \sum \left(n + \frac{1}{2} \right) P_n(y) Q_n(x). \quad (16)$$

Прежде всего вследствие ортогональности и нормировки из этого определения получается интегральное представление Неймана:

$$Q_l(x) = \int_{-1}^{+1} P_l(y) \frac{dy}{x-y}. \quad (16a)$$

1) Определение Q_l у Гейне (Handbuch der Kugelfunktionen) отличается от нашего на множитель 2.

Пользуясь этим представлением, проверим, что, действительно, Q_l и P_l удовлетворяют одному и тому же дифференциальному уравнению. Для доказательства введём обозначение для дифференциального оператора сферических функций

$$L_x = \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx} + l(l+1) \quad (17)$$

и соответственно

$$L_y = \frac{d}{dy}(1-y^2)\frac{d}{dy} + l(l+1). \quad (17a)$$

Тогда из (16а) прежде всего следует, что

$$L_x Q_l(x) = \int_{-1}^{+1} P_l(y) L_x \frac{1}{x-y} dy. \quad (18)$$

Как легко проверить вычислением, имеет место равенство

$$L_x \frac{1}{x-y} = L_y \frac{1}{x-y}.$$

Поэтому можно также написать:

$$L_x Q_l(x) = \int_{-1}^{+1} P_l(y) L_y \frac{1}{x-y} dy. \quad (18a)$$

Интегрируя по частям, преобразуем правую часть к виду:

$$\int_{-1}^{+1} P_l(y) L_y \frac{1}{x-y} dy = \int_{-1}^{+1} L_y P_l(y) \frac{dy}{x-y}. \quad (18b)$$

[Дополнительные члены, появляющиеся в результате интегрирования по частям, пропадают авиду наличия множителя $1-y^2$ а (17а).] Но правая часть (18b) равна нулю вследствие $L P_l = 0$. Поэтому равна нулю и левая часть равенства (18), что и требовалось доказать.

Из (16а) легко вычислить выражение для наимизших Q_l , именно:

$$l=0, \quad P_0(y) = 1, \quad Q_0(x) = \ln \frac{x+1}{x-1}, \quad (19)$$

$$l=1, \quad P_1(y) = y, \quad Q_1(x) = -2 + x \ln \frac{x+1}{x-1} = -2 + P_1(x) \ln \frac{x+1}{x-1}, \quad (19a)$$

$$l=2, \quad P_2(y) = \frac{1}{2}(3y^2 - 1) = P_2(x) + \frac{3}{2}(y^2 - x^2), \quad (19b)$$

$$Q_2(x) = -3x + P_2(x) \ln \frac{x+1}{x-1} \quad \text{и т. д.}$$

Эти выражения непосредственно показывают логарифмический характер функций $Q_l(x)$ и их сингулярность в точках $x = \pm 1$.

Общее выражение для $Q_l(x)$ по Кристоффелю имеет следующий вид:

$$Q_l(x) = -2 \sum_{m=0}^l \frac{2l-4m-1}{(l-m)(2m+1)} P_{l-2m-1} + P_l(x) \ln \frac{x+1}{x-1}, \quad (19в)$$

где верхняя граница суммирования g равна наибольшему целому числу $\leq \frac{1}{2}(l-1)$.

Полиномы Эрмита и Лагерра также имеют производящие функции, именно:

$$\left. \begin{aligned} e^{-t^2+2tx} &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \\ e^{-\frac{xt}{1-t}} &= (1-t) \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

7. ОБЩЕЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГАММА-ФУНКЦИИ

К гл. II, § 7

По сравнению с представлением Эйлера

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^n dx \quad (1)$$

представление (II.7.24) (путь интегрирования: петля, огибающая положительную действительную ось против часовой стрелки)

$$\frac{1}{\Gamma(n+1)} = \frac{e^{i\pi n}}{2\pi i} \int \frac{e^{-y}}{y^{n+1}} dy \quad (2)$$

имеет то преимущество, что оно годится для любых значений n , в то время как (1) пригодно лишь тогда, когда действительная часть n больше -1 . То обстоятельство, что (2) даёт правильные значения для целых n (отрицательных и положительных), именно:

$$n \geq 0, \Gamma(n+1) = n!, \quad n < 0, \Gamma(n+1) = \infty,$$

очевидно; достаточно лишь подставить вместо e^{-y} его степенной ряд и определить вычет подинтегрального выражения:

$$n \geq 0 - \frac{(-1)^n}{n!}, \quad n < 0 - \text{нуль.}$$

Интегрированием по частям из (2), так же как и из (1), получается основная формула Γ -функции:

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n). \quad (3)$$

Следовательно, равенство (2) является во всяком случае возможным аналитическим расширением понятия факториала. То, что это аналитическое расширение понятия факториала совпадает с расширением, которое даётся формулой (1) (оно могло бы прежде всего от него отличаться на произвольную функцию периода 1), доказывается, например, тем, что на основании (2) проверяется формула

$$\Gamma(n)\Gamma(1-n) = \frac{\pi}{\sin n\pi}, \quad (4)$$

причём необходимо ограничиться отрезком вещественной оси

$$0 < n < 1. \quad (4a)$$

Действительно, из (2), если заменить n на $-n$, следует:

$$\frac{1}{\Gamma(1-n)} = \frac{e^{-i\pi n}}{2\pi i} \int e^{-y} y^{n-1} dy, \quad (5)$$

где вследствие (4а) интегрирование мы можем стянуть к действительной оси. Интеграл в (5) тогда будет равен

$$\int_{+\infty}^0 e^{-y} y^{n-1} dy + e^{2i\pi n} \int_0^{\infty} e^{-y} y^{n-1} dy = (-1 + e^{2i\pi n}) \int_0^{\infty} e^{-y} y^{n-1} dy,$$

или, используя определение (1),

$$2ie^{i\pi n} \sin \pi n \Gamma(n).$$

Поэтому равенство (5) приобретает вид:

$$\frac{1}{\Gamma(1-n)} = \frac{\sin \pi n}{\pi} \Gamma(n),$$

что совпадает с (4).

Используя (3) с обратным знаком у n , мы можем (4) записать также в виде:

$$\Gamma(n) \Gamma(-n) = \frac{-\pi}{n \sin \pi n}. \quad (6)$$

С другой стороны, комбинированием (3) и (4) легко получается:

$$\Gamma(1+n) \Gamma(1-n) = \frac{\pi n}{\sin \pi n}. \quad (7)$$

Если, в частности, n чисто мнимо, то вместо последнего равенства будем иметь равенство

$$|\Gamma(1 \pm n)|^2 = \frac{2\pi |n|}{e^{\pi |n|} - e^{-\pi |n|}}. \quad (8)$$

Далее отметим соотношение, которое непосредственно получается путем последовательного применения (3), именно (k — целое, n — произвольное):

$$\frac{1}{\Gamma(n-k)} = \frac{(n-1)(n-2)\dots(n-k)}{\Gamma(n)}. \quad (9)$$

Отсюда, заменяя n через $-n$, получим:

$$\frac{1}{\Gamma(-n-k)} = (-1)^k \frac{(n+1)(n+2)\dots(n+k)}{\Gamma(-n)}. \quad (10)$$

Также простым применением (3) из (8) получается:

$$|\Gamma(2 \pm n)|^2 = \frac{2\pi |n| |1+n|^2}{e^{\pi |n|} - e^{-\pi |n|}}. \quad (11)$$

8. ДАЛЬНЕЙШИЕ СВЕДЕНИЯ О НОРМИРОВКЕ И ОРТОГОНАЛЬНОСТИ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

К гл. II, стр. 77 и гл. IV, стр. 253

Обычные условия нормировки и ортогональности собственных функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ дискретного спектра

$$\int \psi_n^* \psi_m d\tau = \begin{cases} 1 & \text{для } m = n, \\ 0 & \text{для } m \neq n \end{cases} \quad (1)$$

не могут быть без изменений перенесены на случай собственных функций

непрерывного спектра, так как появляющиеся в этом случае интегралы не являются сходящимися. Эту трудность мы, как обычно, обошли тем, что совокупность функций непрерывного спектра аппроксимировали набором функций дискретного спектра и к последним (функциям) применили условия (1) (метод собственного дифференциала; ср. замечание на стр. 108). Теперь мы, наоборот, преобразуем условия (1) таким образом, чтобы их было можно естественным образом применить к собственным функциям непрерывного спектра. С этой целью умножим равенства (1) на произвольные множители a_m и просуммируем по m . Меняя, далее, порядок интегрирования и суммирования, получим:

$$\int \psi_n^* \left(\sum_m a_m \psi_m \right) d\tau = a_n. \quad (2)$$

Равенство (2) есть не что иное, как формула для вычисления коэффициентов разложения произвольной функции F по рассматриваемым собственным функциям:

$$F = \sum_m a_m \psi_m, \quad a_n = \int \psi_n^* F d\tau. \quad (3)$$

Объединяя оба равенства (3), обозначив аргумент в первом равенстве через r , переменную интегрирования во втором равенстве — через r_1 и соответственно написав dr_1 вместо $d\tau$, получим:

$$F(r) = \sum_m \int \psi_m^*(r_1) F(r_1) \psi_m(r) dr_1. \quad (4)$$

Справедливость этого разложения для произвольной функции F является, очевидно, равносильной заменой условий (1) для системы функций ψ (дискретного спектра). [Для того чтобы из второго уравнения (3) получить условие нормировки (1) для $n = \mu$ и условие ортогональности (1) для $n \neq \mu$, необходимо лишь в (3) для F все коэффициенты a_m положить равными нулю, за исключением одного a_μ , который надо положить равным единице.]

Но далее утверждается, что соответствующее положение имеет место также и в случае системы функций непрерывного спектра. В этом случае вместо индекса m надо использовать непрерывно изменяющийся параметр (энергия, импульс, волновое число, ...). Выбирая к примеру в качестве такого параметра волновое число k , мы получим из (4):

$$F(r) = \int dk \int \psi^*(r_1, k) F(r_1) \psi(r, k) dr_1. \quad (5)$$

Рассмотрим в качестве примера систему функций непрерывного спектра, которая принадлежит к пространственному интегралу Фурье:

$$\psi(r, k) = N e^{i(kr)}, \quad (6)$$

и попытаемся найти величину добавленного здесь нормировочного множителя N . Интеграл Фурье, записанный в простейшей форме, как известно, имеет вид:

$$F(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk \int F(r_1) e^{i(k, r-r_1)} dr_1.$$

Мы придём к той же самой форме, если (6) подставим в (5), причём в качестве множителя перед интегралом будет стоять N^2 вместо $(2\pi)^{-3}$. Отсюда заключаем, что

$$N^2 = \frac{1}{(2\pi)^3}. \quad (7)$$

Возвращаясь к общему случаю, т. е. к произвольной системе функций $\psi(r, k)$ непрерывного спектра, разложим (5) на два равенства, аналогичных равенствам (3):

$$F(r) = \int dka(k)\psi(r, k), \quad a(k) = \int dr_1 \psi^*(r_1, k) F(r_1), \quad (8)$$

и соответственно условиям в случае дискретного спектра положим:

$$a(k) = \left\{ \begin{array}{l} 0 \text{ вне} \\ 1 \text{ внутри} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{произвольно малой области} \\ \text{значений } \Delta \text{ переменной } k. \end{array}$$

Тогда из второго уравнения (8) с учётом первого, несколько изменяя обозначения [k_2 вместо k в первом, k_1 вместо k во втором уравнении (8), r вместо r_1], получим:

$$\int dr \psi^*(r, k_1) \int_{\Delta} dk_2 \psi(r, k_2) = \left\{ \begin{array}{l} 0, \\ 1, \end{array} \right. \quad (9)$$

смотря по тому, вне или внутри интервала Δ лежит k_1 . Но это есть точно такая же форма условий, которая даётся уравнениями (7) и (10) в гл. II, § 8. Следовательно, можно сделать вывод: прежние правила ортогонализации и нормировки могут быть обобщены также и на случай непрерывного спектра без искусственного выделения интервала интегрирования Δ в единую форму (5), представляющую произвольную функцию через рассматриваемую систему функций. Хотя новая точка зрения является только формальным изменением старой, она может быть, как это показывает пример интеграла Фурье, весьма полезной.

Очевидно, что, для того чтобы получить равносильную замену прежних правил также и на тот случай, когда система функций имеет частично дискретный и частично непрерывный спектр, необходимо скомбинировать оба представления (4) и (5).

Обсуждаемый здесь метод основан на работе В. Франца¹⁾, применившего его к одной проблеме. (Излучение при переходе из заданного начального состояния в заданное вырожденное конечное состояние; доказательство независимости излучённой энергии от конкретного выбора системы функций, при помощи которой представляется конечное состояние.)

В то время как в предыдущем изложении задача состояла в том, чтобы придать методике единую форму как для случая непрерывного, так и для случая дискретного спектра, теперь попытаемся перенести на случай дискретного спектра ту простую методику нормировки, которая нам известна для случая непрерывного спектра. В непрерывном спектре мы могли очень удобно асимптотически оценить нормировочный интеграл применением теоремы Грина, в то время как прямое вычисление соответствующего интеграла в дискретном спектре оказывается затруднительным. Однако Крамерс²⁾ показал на примере релятивистской проблемы Кеплера, что асимптотическая оценка возможна также и в дискретном спектре. Мы используем эту идею в несколько изменённом виде и применим прежде всего к нерелятивистской проблеме Кеплера.

Пусть ψ будет собственная функция дискретного собственного значения W , т. е. она является непрерывным, везде конечным и исчезающим на бес-

¹⁾ W. Franz, Zs. f. Phys. 90, 623 (1934), особенно § 1.

²⁾ H. A. Kramers, Hand- und Jahrbuch der Chemischen Physik, Bd I (Теория строения материи), стр. 312.

конечности решением волнового уравнения

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(W - V)\psi = 0; \quad (10)$$

далее, пусть W' будет соседним к W значением и ψ' — соседней к ψ функцией, которая удовлетворяет уравнению

$$\Delta\psi' + \frac{2m}{\hbar^2}(W' - V)\psi' = 0. \quad (11)$$

Функция ψ' не является собственной функцией, так как не существует собственных значений, которые были бы сколь угодно близки к W ; поэтому функция ψ' не исчезает на бесконечности, для конечных же расстояний принимается, что она везде регулярна. Умножаем (10) на ψ' , (11) на ψ и поступаем так же, как в случае формулы Грина (ср., например, стр. 49). Тогда получим:

$$\frac{2m}{\hbar^2}(W' - W) \int \psi\psi' d\tau = \int \left(\psi' \frac{\partial\psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial\psi'}{\partial n} \right) d\sigma. \quad (12)$$

После деления этого равенства на $W' - W$ перейдем к пределу $W' \rightarrow W$. Тогда, вследствие того что $\psi' \rightarrow \psi^*$, слева появится интересующий нас с точки зрения нормировки интеграл

$$\int \psi\psi^* d\tau. \quad (12a)$$

Граница интегрирования в правой части (12) относится на бесконечность. Поэтому нам необходимо совершить двойной предельный переход: $W' \rightarrow W$ и $r \rightarrow \infty$. Это обстоятельство мы обозначим тем, что вместо (12) напомним:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int \psi\psi^* d\tau = \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{W' \rightarrow W} \frac{1}{W' - W} \int \left(\psi' \frac{\partial\psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial\psi'}{\partial n} \right) d\sigma. \quad (12b)$$

В дальнейшем необходимо принять во внимание лишь радиальную часть R собственной функции ψ , предполагая, что интегрирование по углам в (12) уже выполнено. (Угловые части ψ и ψ' одинаковы с точностью до знака при l .) Обозначим радиальную часть ψ' через R' ; R' , так же как и R , действительна. Положим:

$$R' = R + (W' - W)S, \quad S = \left(\frac{\partial R'}{\partial W'} \right)_{W'=W}. \quad (13)$$

Тогда предельный переход может быть непосредственно произведен, и мы получим из (12b):

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty R^2 r^2 dr = \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ r^2 \left(S \frac{dR}{dr} - R \frac{\partial S}{\partial r} \right) \right\}. \quad (14)$$

Обратимся теперь к асимптотическому представлению в уравнениях (30), (31), (32) гл. II, § 7, которые были использованы там для случая непрерывного спектра ($W > 0$), с мнимой величиной $\rho = 2lkr$ и мнимой величиной $n = Z/lka$. Те же самые уравнения справедливы также и для случая дискретного спектра ($W < 0$), т. е. в рассматриваемом случае для собственной функции R и соседней функции R' , но с той разницей, что в этом случае

ρ и n будут действительными величинами:

$$\rho = \frac{2r}{\hbar} \sqrt{-2mW}, \quad (15)$$

$$n = \frac{Z}{a} \frac{\hbar}{\sqrt{-2mW}} \quad (15a)$$

[ср. с этим (II.1.4a) и формулу Бальмера (II.1.10)].

Рассмотрим с этой точки зрения отдельно оба выражения Q_1 и Q_2 из (II.7.31' и 32). Мы имели

$$\frac{1}{2} Q_1 = e^{-\rho/2} \rho^{n-1} \frac{e^{-i\pi(n-l/2)}}{\Gamma(n+l+1)}. \quad (15б)$$

Эта величина исчезает при $\rho \rightarrow \infty$ независимо от того, является ли n целым, как в R , или не точно целым, как в R' , так как знаменатель $\Gamma(n+l+1)$ при любом положительном n остаётся во всяком случае конечным.

С другой стороны, мы имели

$$\frac{1}{2} Q_2 = e^{\rho/2} (-\rho)^{-n-1} \frac{e^{-i\pi(n+l/2)}}{\Gamma(-n+l+1)}. \quad (15в)$$

Принимая во внимание, что $n = n_r + l + 1$, видим, что в случае собственной функции R аргумент Γ -функции равен отрицательному целому $-n_r$; поэтому значение Γ -функции равно бесконечности и Q_2 исчезает при любых r , в том числе и при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, собственная функция R сводится к части, даваемой (15б); её асимптотическое поведение характеризуется хорошо известным экспоненциальным падением

$$R = \frac{1}{2} Q_1 = e^{-\rho/2} \rho^{n-1} \frac{e^{-i\pi(n-l/2)}}{(n+l)!}. \quad (16)$$

Переходя к функции R' , мы должны лишь в (15) и (15а, б, в) заменить n , ρ , W через n' , ρ' , W' , положив $n' = n + \delta$ (δ мало); тогда, вследствие того что главное квантовое число $n = n_r + l + 1$, будем иметь:

$$-n' + l + 1 = -n_r - \delta.$$

Подставим последнее равенство в (15в), переходя во всех остальных множителях к пределу $n' = n$, $\rho' = \rho$. Получающееся таким образом значение для $\frac{1}{2} Q_2$ не равно нулю, коль скоро отлична от нуля величина δ ; более того, при достаточно больших δ это значение очень велико по сравнению с величиной $\frac{1}{2} Q_1$. Поэтому вычисления можно производить с

$$R' = \frac{1}{2} Q_2 = e^{\rho/2} (-\rho)^{-n-1} \frac{e^{-i\pi(n+l/2)}}{\Gamma(-n_r - \delta)}. \quad (16a)$$

Отсюда следует:

$$S = \left(\frac{\partial R'}{\partial W'} \right)_{W'=W} = e^{\rho/2} (-\rho)^{-n-1} e^{-i\pi(n+l/2)} \frac{d\delta}{dW} \left\{ \right\}, \quad (16б)$$

где для сокращения записи положено:

$$\left\{ \right\} = \left\{ \frac{d}{d\delta} \frac{1}{\Gamma(-n_r - \delta)} \right\}_{\delta=0}. \quad (16в)$$

Для вычисления (16в) обратимся к известному соотношению (4) из дополнения 7, которое запишем в виде:

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = \Gamma(1-x) \frac{\sin \pi x}{\pi}.$$

Положив в этом соотношении $x = -(n_r + \delta)$, при малых δ будем иметь:

$$\frac{1}{\Gamma(-n_r - \delta)} = (-1)^{n_r+1} n_r! \delta.$$

Отсюда для (16в) получаем следующее значение:

$$\{ \} = (-1)^{n_r+1} n_r!. \quad (16г)$$

Далее, на основании (15) имеем:

$$\frac{dn'}{dW} = -\frac{n'}{2W'},$$

и, учитывая, что $n' = n_r + \delta + l + 1$, получим:

$$\frac{db}{dW'} = \frac{dn'}{dW'} = -\frac{n'}{2W'} = -\frac{n}{2W}. \quad (16д)$$

Подстановка (16г, д) в (166) при соответствующем собирании корней из единицы даёт:

$$S = -e^{\rho/2} (-\rho)^{-n-1} e^{i\pi/2} n_r! \frac{n}{2W}, \quad (17)$$

а при учёте связи между ρ и r в (15)

$$\frac{dS}{dr} = \frac{dS}{d\rho} \frac{\rho}{r} = \frac{1}{2} S \frac{\rho}{r} + \dots \quad (17а)$$

Многоточие означает, что в пределе $\rho \rightarrow \infty$ членом, появляющимся при дифференцировании степени, можно пренебречь по сравнению с выписанным членом. Тем же самым путём из (16) следует:

$$\frac{dR}{dr} = -\frac{1}{2} R \frac{\rho}{r} + \dots \quad (17б)$$

Поэтому имеет место равенство

$$S \frac{dR}{dr} = -R \frac{dS}{dr} = -\frac{1}{2} RS \frac{\rho}{r}. \quad (18)$$

Следовательно, правая часть (14) принимает вид:

$$-prRS. \quad (18а)$$

Подставляя в последнее выражение вместо ρ , R , S их значения из (15), (16) и (17), получим:

$$-\frac{1}{4W} \frac{\hbar}{\sqrt{-2mW}} e^{i\pi l} \frac{nn_r!}{(n+l)!}. \quad (18б)$$

Поэтому нормировочный интеграл в (14) равен [надо учесть также (15а)]:

$$\int R^2 r^2 dr = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{-2mW}} \right)^2 e^{i\pi l} \frac{nn_r!}{(n+l)!} = \frac{1}{4} \left(\frac{an}{Z} \right)^2 e^{i\pi l} \frac{nn_r!}{(n+l)!}. \quad (19)$$

Полученное выражение необходимо сравнить с равенством (II.2.15), которое имеет вид:

$$\int R^2 r^2 dr = N_r^{-2} = \frac{1}{4} \left(\frac{an}{Z} \right)^2 \frac{n[(n+l)!]^2}{n_r!}. \quad (19а)$$

Причина различия между (19) и (19а) кроется в том обстоятельстве, что определение радиальных собственных функций в дискретном спектре несколько отличается от определения R , которое мы в целях удобства ввели и в предыдущих вычислениях использовали в случае непрерывного спектра. На это отличие было уже указано в гл. II, § 7:

а) в уравнении (II.7.12): определение для $L_n(\rho)$ необходимо умножить на $n!$, чтобы привести его в соответствие с определением в дискретном спектре;

б) в уравнении (II.7.27): соответствующий множитель, так как дело идёт о $L_{n+l}(\rho)$, здесь будет равен

$$(n+l)!; \quad (б)$$

в) в том же уравнении опущен множитель, появляющийся в результате $(2l+1)$ -кратного дифференцирования:

$$(n+l)(n+l-1)\dots(n-l) = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} = \frac{(n+l)!}{n_l!}; \quad (в)$$

этот множитель необходимо теперь добавить;

г) в том же уравнении был добавлен множитель

$$(-l)^l = e^{-i\pi l/2}, \quad (г)$$

на который теперь необходимо разделить.

В целом появится множитель

$$\frac{(б)(в)}{(г)} = \frac{[(n+l)!]^2}{n_l!} e^{i\pi l/2}. \quad (19б)$$

В (19) функция R входит в квадрате, поэтому в квадрате войдёт также и множитель (19б). Но тогда (19), как это и должно быть, точно переходит в (19а).

Всё превосходство этого метода по сравнению с прямым вычислением (ср. примечание на стр. 253) проявляется лишь в релятивистской проблеме Кеплера. Здесь мы имеем две радиальные собственные функции и нормировочный интеграл имеет вид:

$$\int_0^{\infty} (R_1^2 + R_2^2) r^2 dr.$$

В качестве аналога формулы Грина в непрерывном спектре была выведена формула (IV.10.7), которую мы более подробно по образцу (12) выпишем в следующем виде:

$$\int_0^{\infty} (R_1^2 + R_2^2) r^2 dr = \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{E' \rightarrow E} \frac{\hbar c}{E' - E} r^2 (R_1' R_2 - R_1 R_2'). \quad (20)$$

R_1' и R_2' являются функциями, близкими к R_1 , R_2 , удовлетворяющими одновременно тем же самым дифференциальным уравнениям, что и R_1 , R_2 , но с величиной E' вместо E . Величина E' отличается от E насколько угодно малую величину. В левой части, где первоначально было $R_1 R_1' + R_2 R_2'$ вместо $R_1^2 + R_2^2$, мы уже совершили предельный переход $E' \rightarrow E$.

Но уравнение (20) справедливо также и в дискретном спектре, так как оно было выведено, исходя только из дифференциальных уравнений задачи.

Различие заключается лишь в том, что теперь E' не является собственным значением, а R'_1 , R'_2 более не являются собственными функциями: они, правда, должны удовлетворять условиям непрерывности в нулевой точке, но на бесконечности могут теперь и не исчезать.

Разложим R'_1 и R'_2 в точке $E' = E$. Получим:

$$R'_1 = R_1 + (E' - E)S_1 + \dots, \quad R'_2 = R_2 + (E' - E)S_2 + \dots \quad (21)$$

$$S_1 = \left(\frac{\partial R'_1}{\partial E'} \right)_{E' = E}, \quad S_2 = \left(\frac{\partial R'_2}{\partial E'} \right)_{E' = E}. \quad (21a)$$

Тогда правая часть (20) принимает вид:

$$\hbar c r^3 (S_1 R_2 - R_1 S_2), \quad (216)$$

при этом уже совершен один из предельных переходов, а именно, предельный переход $E' \rightarrow E$. Для выполнения второго предельного перехода, именно $r \rightarrow \infty$, необходимо воспользоваться результатами дополнения 16, равенства (10) и (11).

Из двух представленных в этом дополнении асимптотических частей $\frac{1}{2} G_1$ и $\frac{1}{2} G_2$ конфлюэнтной гипергеометрической функции $F(\alpha, \gamma, \rho)$ вторая часть имеет $\Gamma(\alpha)$ в знаменателе. В нашем случае, согласно (IV.8.29), имеются две функции: $Q_2 = {}_2F_1(-n_r, 2\sqrt{-} + 1, \rho)$ и $Q_1 = {}_2F_1(-n_r + 1, 2\sqrt{-} + 1, \rho)$. Следовательно, мы имеем:

$$y Q_2 \left\{ \begin{array}{l} \alpha = -n_r \\ \gamma = 2\sqrt{-} + 1 \end{array} \right. \text{ и соответственно } y Q_1 \left\{ \begin{array}{l} \alpha = -n_r + 1 \\ \gamma = 2\sqrt{-} + 1 \end{array} \right.$$

Поэтому $\Gamma(\alpha)$ обращается в бесконечность при целом n_r (случай $n_2 = 0$ у Q_2 необходимо рассмотреть особо). Следовательно, $\frac{1}{2} G_2$ в асимптотическом выражении R_1 и R_2 пропадает. Что же касается $\frac{1}{2} G_1$, то здесь имеется множитель $(-\rho)^{-\alpha}$, который у Q_2 имеет на один порядок большую величину, чем у Q_1 . Поэтому в пределе при $\rho \rightarrow \infty$ можно пренебречь Q_1 по сравнению с Q_2 . Тогда из (IV.8.30) на основании равенства (10) в дополнении 16 получается:

$$P_2 = -\varepsilon P_1 = \varepsilon A \frac{\Gamma(\gamma)(-\rho)^{n_r}}{\Gamma(\gamma + n_r)},$$

а на основании равенства (IV.8.21) следует:

$$\left. \begin{array}{l} R_1 \\ R_2 \end{array} \right\} = (-1)^{n_r} A e^{-\rho/2} \rho^{n_r - 1 + \sqrt{-}} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma + n_r)} \left\{ \begin{array}{l} -1, \\ 3. \end{array} \right. \quad (22)$$

Иначе обстоит дело у R'_1 и R'_2 . В этом случае соответственно замене E через E' мы должны n_r заменить через нецелое число $n_r + \delta$. Но тогда $\frac{1}{2} G_2$ не исчезает, больше того, ввиду наличия множителя e^ρ G_2 велико по сравнению с G_1 . Поэтому необходимо пренебречь G_1 . Далее, в G_2 [ср. дополнение 16, равенство (11)] ввиду наличия множителя $\rho^{\alpha - \gamma} Q_1$ на один порядок больше Q_2 . Следовательно, теперь можно пренебречь Q_2 . Тогда на основании

(IV.8.30) и равенства (11) в дополнении 16 получается:

$$P_2 = \varepsilon P_1 = \varepsilon \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(-n_r - \delta + 1)} e^{\rho} \rho^{-n_r - \delta + 1 - \gamma}$$

и отсюда на основании равенства (IV.8.21) следует:

$$\left. \begin{matrix} R'_1 \\ R'_2 \end{matrix} \right\} = e^{+\rho/\varepsilon} \rho^{-n_r - \delta - 1 - \gamma} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(-n_r - \delta + 1)} \left\{ \begin{matrix} 1, \\ \varepsilon. \end{matrix} \right. \quad (23)$$

Теперь надо ещё перейти к величинам

$$S = \left(\frac{\partial R'}{\partial E'} \right)_{E'=E} = \left\{ \left(\frac{\partial R'}{\partial \delta} \right) / \frac{dE'}{d\delta} \right\}_{\delta=0}. \quad (23a)$$

При этом, как и в (17в), при дифференцировании R' по δ необходимо продифференцировать лишь знаменатель $\Gamma(-n_r - \delta + 1)$. Аналогично (16г) получим:

$$\frac{d}{d\delta} \frac{1}{\Gamma(-n_r - \delta + 1)} = (-1)^{n_r} (n_r - 1)!.$$

Таким образом, положив в остальных множителях $\delta = 0$, из (23) получим [лишь при этом ρ в (23) будет совпадать с ρ в (22)]:

$$\left. \begin{matrix} S_1 \\ S_2 \end{matrix} \right\} = (-1)^{n_r} (n_r - 1)! e^{+\rho/\varepsilon} \rho^{-n_r - 1 - \gamma} \frac{\Gamma(\gamma)}{(dE'/d\delta)} \left\{ \begin{matrix} 1, \\ \varepsilon. \end{matrix} \right. \quad (24)$$

В последнее выражение необходимо ещё подставить значение $dE'/d\delta$. Это значение получается из формулы тонкой структуры (IV.7.50), если в ней заменить E через E' и n_r через $n_r + \delta$ и положить после дифференцирования $\delta = 0$, $E' = E$. Тогда получим:

$$\frac{dE'}{d\delta} = \frac{1}{\alpha Z} \frac{(E_0^2 - E^2)^{3/2}}{E_0^2}. \quad (25)$$

Теперь из (22), (24) и (25) образуем выражения:

$$S_1 R_2 = -R_1 S_2 = \varepsilon A \alpha Z \frac{(n_r - 1)!}{\rho^2} \frac{\Gamma^2(\gamma)}{\Gamma(\gamma + n_r)} \frac{E_0^2}{(E_0^2 - E^2)^{3/2}}. \quad (26)$$

Заметим ещё, что на основании (IV.8.21а) мы имеем:

$$\left(\frac{r}{\rho} \right)^2 = \frac{\hbar^2 c^2}{4(E_0^2 - E^2)} \quad (26a)$$

и на основании (IV.7.43) получается:

$$\varepsilon = \frac{E_0 - E}{\sqrt{E_0^2 - E^2}}. \quad (26b)$$

Поэтому, подставляя (26), (26а, б) в выражение (21б) для нормировочного интеграла в (20), найдём:

$$\int (R_1^2 + R_2^2) r^2 dr = \frac{A \alpha Z}{2} \hbar^2 c^2 (n_r - 1)! \frac{\Gamma^2(\gamma)}{\Gamma(\gamma + n_r)} \frac{E_0^2}{(E_0 + E)(E_0^2 - E^2)^2}. \quad (27)$$

Это выражение переходит в прежнее выражение (19), если в нём сделать соответствующие нерелятивистскому случаю пренебрежения ($\gamma \rightarrow 2|k| + 1$, $R_3 \rightarrow 0$, $E_0 - E \ll E_0 + E$), учесть связь между квантовыми числами обоих случаев из (IV.8.3) и т. д. и принять во внимание несколько различные определения R в (19) и R_1 в (27).

9. ФОРМУЛА МОРЗЕ В ТЕОРИИ ПОЛОСАТЫХ СПЕКТРОВ

К гл. II, § 12

Величина x из равенства (IX.2.8) в т. I необходима при исследовании полосатых спектров. Она учитывает ангармоничность колебаний, и мы должны иметь возможность давать ей произвольное значение. В формуле Кратцера (18) на стр. 131 этого тома эта величина будет произвольной только тогда, когда будут сохранены поправочные члены с b , c , ..., в противном случае она имела бы постоянное значение

$$x = \frac{3}{2} u = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{J\omega_0}$$

[ср. (18) из дополнения 13 в т. I].

Поэтому очень удобной для практики полосатых спектров и для теории строения молекул является формула Морзе¹⁾, которая позволяет выбирать величину x произвольным образом. Обе формулы учитывают взаимную потенциальную энергию атомов в двухатомной молекуле. Если отбросить поправочные члены Кратцера, то эти формулы гласят:

$$V = f(\rho) = A - B \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right) \quad (\text{Кратцер}), \quad (1)$$

$$V = f(\rho) = A - 2De^{-\beta(\rho-1)} + De^{-2\beta(\rho-1)} \quad (\text{Морзе}). \quad (2)$$

Здесь $\rho = \frac{r}{a}$, причём r есть расстояние атомов друг от друга и a — их расстояние друг от друга в положении равновесия. Отсюда мы имеем:

На основании (1)	На основании (2)
$f(\infty) = A$	A
$f(1) = A - B/2$	$A - D$
$f'(1) = 0$	0
$f''(1) = B$	$2D\beta^2$

Из $f''(1)$ исключается круговая частота ω_0 малых колебаний около положения равновесия $\rho = 1$. Именно, в общем случае найдём [ср. также более специальное равенство (19) на стр. 131]:

$$J\omega_0^2 = f''(1), \quad J = ma^2,$$

и, следовательно, на основании (1) или (2) получается:

$$J\omega_0^2 = B, \quad (3_1)$$

$$J\omega_0^2 = 2D\beta^2. \quad (3_2)$$

¹⁾ P. H. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929), см. также W. Lotmar, Zs. f. Phys. **93**, 528 (1934).

Следовательно, B и соответственно D необходимо выбирать положительными. Отсюда в обоих случаях следует, что $f''(1) > 0$; поэтому положение равновесия $\rho = 1$ является, как это и должно быть, положением минимума потенциальной энергии $f(\rho)$.

Потенциал ионизации молекулы определяется из условия

$$f(\infty) - f(1) = B/2 \text{ и соответственно } = D. \quad (4)$$

Формула (1) содержит только одну существенную константу, которая уже определена равенством (3). (Константа A в обеих формулах несущественна для вида кривой $f(\rho)$.)

Формула же (2) содержит две существенные константы D и β , из которых лишь одна определена равенством (3₃). Мы увидим, что вторую константу β можно выбрать таким образом, чтобы она передавала ангармоничный характер колебаний.

Следовательно, формула (2) по сравнению с формулой (1) более приспособлена к практическим требованиям. Мы покажем, что она, так же как и (1), ведёт к точно разрешимой задаче на собственные значения, правда при том ограничении, что мы должны пренебречь вращением молекулы и учесть последнее позднее по методу теории возмущений. Положение дел, следовательно, таково: формула Кратцера (1) позволяет точно учесть одновременное наличие колебаний и вращений, однако ангармонический характер колебаний учитывается лишь приближённо (при помощи поправочных членов с b, c, \dots). Формула Морзе (2) позволяет точно учесть ангармонический характер колебаний, но вращение учитывается лишь приближённо.

Подставляя (2) в уравнение (17) на стр. 131 и одновременно полагая $j = 0$, получим для радиальной части собственной функции, которую теперь обозначим через R вместо прежнего обозначения F , следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2J}{\hbar^2} (W - A + 2De^{-\beta(\rho-1)} - De^{-2\beta(\rho-1)}) R = 0. \quad (5)$$

Введя новую независимую переменную

$$y = e^{-\beta(\rho-1)}, \quad (6)$$

это уравнение можно привести к виду:

$$\frac{d^2 R}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{dR}{dy} + \frac{2JD}{\beta^2 \hbar^2} \left(\frac{W-A}{D} \frac{1}{y^2} + \frac{2}{y} - 1 \right) R = 0. \quad (7)$$

Отсюда видим, что при $y \rightarrow \infty$ R ведёт себя асимптотически, как

$$e^{\pm z} \quad \text{с} \quad z = \frac{\sqrt{2JD}}{\beta \hbar} y.$$

Поэтому, выбирая из двух знаков подходящий для нас, полагаем:

$$R = e^{-z} \varphi(z). \quad (8)$$

Отсюда для φ получаем дифференциальное уравнение (штрихи означают дифференцирование по z):

$$z^2 \varphi'' + z(1-2z) \varphi' + \left[\frac{2J}{\beta^2 \hbar^2} (W-A) + \frac{2\sqrt{2JD} - \beta \hbar}{\beta \hbar} z \right] \varphi = 0. \quad (9)$$

Это уравнение допускает решение методом полинома. Сравнение с уравнением (9) в дополнении 2 даёт $h = 1$ и

$$\begin{aligned} A_2 &= 1, & B_2 &= 0, & A_1 &= 1, & B_1 &= -1, \\ A_0 &= \frac{2J}{\beta^2 \hbar^2} (W - A) = \frac{4D}{(h\nu_0)^2} (W - A), \\ B_0 &= \frac{2\sqrt{2JD}}{\beta \hbar} - 1 = \frac{4D}{h\nu_0} - 1, \end{aligned}$$

при этом в обоих последних выражениях мы подставили значение β из равенства (3₂) и одновременно учли, что $\hbar\omega_0 = h\nu$. Из равенства (10) в дополнении 2 для характеристического показателя будем иметь уравнение

$$\alpha^2 + \frac{4D}{(h\nu_0)^2} (W - A) = 0. \quad (10)$$

Наконец, из равенства (12) в дополнении 2, если показатель степени полинома n положить равным «вибрационному квантовому числу» v , получаем:

$$2(\alpha + v) = \frac{4D}{h\nu_0} - 1, \quad \alpha = \frac{2D}{h\nu_0} - \left(v + \frac{1}{2}\right). \quad (11)$$

Комбинируя (10) и (11), исключим α и получим сразу, что

$$W = A - D + h\nu_0 \left(v + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \frac{h\nu_0}{4D} \left(v + \frac{1}{2}\right)\right]. \quad (12)$$

Сравнивая это выражение с равенством (8) § 2 гл. IX т. I, замечаем, что оба выражения, если отвлечься от постоянного члена $A - D$, который выпадает при вычислении разностей термов, переходят друг в друга, если положить:

$$x = \frac{h\nu_0}{4D}. \quad (13)$$

Величины x и ν_0 известны из эмпирической структуры краёв полосатых спектров. Следовательно, равенство (13) даёт значение коэффициента D , используемого в формуле Морзе. Одновременно (3₂) даёт равенство

$$\beta = \sqrt{\frac{2\pi^2 J \nu_0^2}{D}} = \sqrt{\frac{8\pi^2 J \nu_0 x}{h}}. \quad (14)$$

Тем самым определён вид потенциальной кривой (2). Схематически эта кривая представлена на рис. 57. Асимметрия потенциальной ямы в окрестности $\rho = 1$ обуславливает ангармонический характер колебаний. Степень этой асимметрии зависит от численного значения x .

Для того чтобы установить аналитический вид полиномов, входящих в собственные функции, сделаем следующую подстановку:

$$\varphi = z^v Q, \quad (15)$$

причём на основании предшествующего Q является полиномом степени v . Действительно, подставив (15) в (9) и используя соотношения (14) и (11), после сокращения на z получим для Q дифференциальное уравнение типа дифференциального уравнения конфлюэнтной гипергеометрической функции, именно:

$$zQ'' + (2\alpha + 1 - 2z)Q' + 2vQ = 0. \quad (16)$$

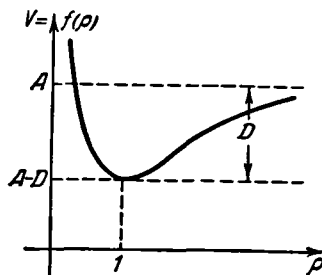


Рис. 57. Вид потенциальной кривой по Морзе для вычисления ангармонических колебаний двухатомной молекулы.

Решение этого уравнения имеет вид:

$$Q = F(-v, 2\alpha + 1, 2z). \quad (17)$$

Но, согласно представлению гипергеометрической функции F в виде ряда, это и означает, что Q есть действительно полином степени v . Этот результат также и формально совпадает с соответствующим результатом, касающимся формулы Кратцера в равенстве (II.11.31). Воспользовавшись (11) и (13), можно также написать следующее представление:

$$Q = F\left(-v, \frac{1}{x} - 2v, 2z\right). \quad (17a)$$

Отсюда получается решение (7) в следующем виде:

$$R = e^{-\frac{y}{2x}} \left(\frac{y}{2x}\right)^{\frac{2}{x} - v - \frac{1}{2}} F\left(-v, \frac{1}{x} - 2v, \frac{y}{x}\right). \quad (18)$$

Необходимо ещё сказать несколько слов относительно приближённого учёта вращательных термов. Если j означает квантовое число, характеризующее вращение, то в левую часть равенства (5) необходимо добавить член из равенства (17) на стр. 131:

$$-\frac{j(j+1)}{\rho^2} R.$$

Очевидно, что при переходе к переменной y [уравнение (7)] получающееся в этом случае дифференциальное уравнение уже не может быть решено точно. Однако при этом мы замечаем, что в окрестности «дна» потенциальной ямы, т. е. при ограничении рассмотрения малыми колебаниями, приблизительно соблюдается равенство $\rho = 1$. Благодаря этому член, возникающий при учёте вращения, может быть приближённо заменён через

$$-j(j+1)R.$$

Этот член вместе с константой A в скобках уравнения (5) объединяется в член вида:

$$A + \frac{j(j+1)\hbar^2}{2J}.$$

Вследствие этого также и в окончательной формуле (12) к A добавляется член

$$\frac{j(j+1)\hbar^2}{2J}.$$

Но это есть точно член энергии, возникающий при учёте вращения, как он нам известен, например, из равенства (29) на стр. 134.

10. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ К ОБЩИМ КРИВОЛИНЕЙНЫМ КООРДИНАТАМ, ИСКЛЮЧЕНИЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ УСЛОВИЙ

К гл. II, § 12, равенство (8)

Рассмотрим систему многих материальных точек, которые будем считать свободными. Координаты этих точек x_i и их массы m_i пронумеруем числами от 1 до n (n делится на 3; x_1, x_2, x_3 означают прямоугольные координаты первой точки, $m_1 = m_2 = m_3$ — массу первой точки и т. д.). При этих условиях гамильтонova функция H волновой механики из дополнения 4,

равенство (15а), запишется в виде:

$$H = \sum_1^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right)^2 + V \psi^2, \quad (1)$$

и указанный там вариационный принцип будет гласить:

$$\delta \int H d\tau = 0, \quad \int \psi^2 d\tau = 1, \quad d\tau = \prod_{i=1}^n dx_i. \quad (2)$$

Так же как и в обычной механике, преимущество вариационного принципа заключается в его независимости от конкретного выбора координатной системы. Это обстоятельство и будет нами использовано. Но прежде перейдём к другим переменным, положив

$$\xi_i = \sqrt{m_i} x_i. \quad (3)$$

Следовательно, каждая координата x_i берётся в вычислениях с весом $\sqrt{m_i}$. Это сделано для того, чтобы придать евклидову форму n -мерному линейному элементу ds^2 , определяемому кинетической энергией системы. Действительно, мы имеем:

$$T = \frac{1}{2} \sum m_i \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} \sum \left(\frac{d\xi_i}{dt} \right)^2 \quad (3a)$$

и, следовательно, с $ds^2 = \sum d\xi_i^2$ можно написать:

$$T = \frac{1}{2} \left(\frac{ds}{dt} \right)^2. \quad (3б)$$

Очевидно, что в n -кратном многообразии переменных ξ_i геометрические соотношения, как «ортогональность», «эквидистантность», выражаются проще, чем при пользовании n -кратным многообразием переменных x_i .

Для того чтобы перейти от ξ_i к новым криволинейным координатам q_k , полагаем:

$$\xi_i = \xi_i(q_1, \dots, q_n) = \xi_i(q_k). \quad (4)$$

Пусть выражение новых переменных через старые имеет вид:

$$q_k = q_k(\xi_i). \quad (4a)$$

При этих условиях найдём:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial \psi}{\partial q_k} q_{ki} \sqrt{m_i}, \quad (5)$$

где введено обозначение

$$q_{ki} = \frac{\partial q_k}{\partial \xi_i}. \quad (6)$$

Величина q_{ki} есть i -я компонента нормали к плоскости $q_k = \text{const}$:

$$q_{ki} = \text{Grad}_i q_k. \quad (6a)$$

При этом операция взятия градиента производится в евклидовом пространстве переменных ξ .

Из (4а) при помощи дифференцирования по t и учитывая значение q_{ki} , даваемое (6), получим:

$$\dot{q}_k = \sum_i q_{ki} \dot{\xi}_i.$$

Отсюда получается другое представление для q_{ki} :

$$q_{ki} = \frac{\dot{\partial} q_k}{\partial \dot{\xi}_i}. \quad (66)$$

Внося выражение (5) в правую часть (1), найдём:

$$\sum_i \frac{1}{2m_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{1}{2} \sum_{k, l} g^{kl} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \frac{\partial \psi}{\partial q_l}, \quad (7)$$

где положено:

$$g^{kl} = \sum_i q_{ki} q_{li} = \sum_i \frac{\partial q_k}{\partial \xi_i} \frac{\partial q_l}{\partial \xi_i} = (\text{Grad } q_k, \text{ Grad } q_l). \quad (8)$$

Теперь убедимся, что также и в выражении кинетической энергии классической механики появляются те же самые коэффициенты g^{kl} , если эта энергия будет выражена как функция импульсов p , канонически сопряжённых к скоростям \dot{q} . Это выражение кинетической энергии обозначим через T_p в отличие от соответствующего выражения T_q , рассматриваемого как функция скоростей \dot{q} . Последнее выражение на основании (3а) и (4) имеет вид:

$$T_q = \frac{1}{2} \sum_{k, l} g_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l, \quad (9)$$

где

$$g_{kl} = \sum_i \frac{\partial \xi_i}{\partial q_k} \frac{\partial \xi_i}{\partial q_l}. \quad (10)$$

С другой стороны, для того чтобы получить выражение для T_p , продифференцируем (3а) по $\dot{\xi}_i$. Тогда ввиду тождества $T \equiv T_q$ получим:

$$\dot{\xi}_i = \sum_k \frac{\partial T_q}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{\xi}_i}. \quad (11)$$

Используя (66) и хорошо известное равенство

$$p_k = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_k} T_q, \quad (12)$$

вместо (11) можно написать:

$$\dot{\xi}_i = \sum_k q_{ki} p_k. \quad (12a)$$

Подставляя это выражение в тождество $T \equiv T_p$, найдём:

$$T_p = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{kl} q_{ki} q_{li} p_k p_l. \quad (126)$$

Имеющийся в этом равенстве коэффициент $\frac{1}{2} p_k p_l$ совпадает с (8). Поэтому можно также написать:

$$T_p = \frac{1}{2} \sum g^{kl} p_k p_l. \quad (13)$$

Одновременно видно, что нами получена правая часть выражения (7), если только в (13) заменить p на $\frac{\partial \psi}{\partial q}$, что мы отметим, записав

$$T_p \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right).$$

При этих условиях выражение (1) переходит в следующее выражение:

$$H = \hbar^2 T_p \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) + V \psi^2. \quad (14)$$

Перейдём теперь к равенствам (2), т. е. к вариационному принципу. При этом вместо первоначальных переменных интегрирования x можно с тем же правом использовать более удобные переменные ξ . Если мы затем перейдём от переменных интегрирования ξ к переменным q , то надо произвести замену по следующей схеме:

$$d\tau \text{ через } D dq, \quad d\tau = \prod_{k=1}^n d\xi_k, \quad dq = \prod_{k=1}^n dq_k.$$

Через D обозначен n -рядный функциональный детерминант:

$$D = \begin{vmatrix} \frac{\partial \xi_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial \xi_1}{\partial q_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \xi_n}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial \xi_n}{\partial q_n} \end{vmatrix}. \quad (15)$$

Этот же детерминант D войдёт как в вариационный принцип, так и в связанное с ним равенствами (2) дополнительное условие $\int \psi^2 d\tau = 1$; появляющийся в последнем условии множитель будем обозначать через W . Производя варьирование, получим следующее волновое уравнение в произвольных координатах:

$$\hbar^2 \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left(D \frac{\partial T_p(q, p)}{\partial p_k} \right) + 2D(W - V)\psi = 0, \quad (16)$$

где, очевидно, в выражении

$$\frac{\partial T_p}{\partial p_k} = \sum_l g^{kl} p_l$$

надо p_l заменить через $\frac{\partial \psi}{\partial q_l}$.

Надо ещё показать, что также и детерминант D может быть вычислен из величин g^{kl} . Для этой цели наряду с D рассмотрим также «обратный» функциональный детерминант:

$$D_1 = \begin{vmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial \xi_1} & \dots & \frac{\partial q_n}{\partial \xi_1} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial q_1}{\partial \xi_n} & \dots & \frac{\partial q_n}{\partial \xi_n} \end{vmatrix}, \quad (17)$$

а также квадрат этого детерминанта и его произведение на D . По теореме о произведении детерминантов (перемножаем столбцы друг на друга) для квадрата получается следующее выражение:

$$D_1^2 = |g^{kl}|, \quad (18)$$

т. е. «дискриминант» Δ квадратичной формы (13). С другой стороны, на основании той же теоремы (перемножаем строки друг с другом) найдём:

$$DD_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 1. \quad (19)$$

Из (18) и (19) заключаем, что

$$D = \frac{1}{\sqrt{\Delta}}. \quad (20)$$

Особенно простой вид принимают эти соотношения в случае ортогональных координат, т. е. в том случае, когда T_q в равенстве (9) содержит лишь квадраты величин \dot{q} и не содержит произведений \dot{q} с различными индексами. В этом случае имеем:

$$T_q = \frac{1}{2} \sum g_{kk} \dot{q}_k^2, \quad q_{kl} = 0. \quad (21)$$

Тогда из (11) следует:

$$p_k = g_{kk} \dot{q}_k, \quad T_p = \frac{1}{2} \sum \frac{p_{kk}^2}{g_{kk}}. \quad (21a)$$

и из (13) получается:

$$g^{kk} = \frac{1}{g_{kk}}, \quad g^{kl} = 0.$$

Далее будем иметь:

$$\Delta = \Pi g^{kk} = (\Pi g_{kk})^{-1}, \quad D = (\Pi g_{kk})^{+1/2}.$$

Отсюда волновое уравнение (16), например, в случае трёх степеней свободы принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial q_1} \sqrt{\frac{g_{22}g_{33}}{g_{11}}} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2} \sqrt{\frac{g_{33}g_{11}}{g_{22}}} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \sqrt{\frac{g_{11}g_{22}}{g_{33}}} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} + \frac{2}{h^2} \sqrt{g_{11}g_{22}g_{33}} (W - V) \psi = 0. \quad (22)$$

Уравнение (16) со значением D из (20) было получено уже Шредингером¹⁾ и с тех пор часто применялось не только в случае свободных частиц, как это предполагалось до сих пор в нашем выводе (отсутствие дополнительных условий), но также и в случае взаимосвязанных частиц (ν — число степеней свободы, $n - \nu$ — число дополнительных условий). Теперь мы рассмотрим этот последний случай.

Прежде всего выясним положение дел с точки зрения классической механики. В этом случае вместо прямоугольных координат вводятся такие криволинейные координаты $q_1, \dots, q_\nu, q_{\nu+1}, \dots, q_n$, чтобы уравнения, выражающие дополнительные условия, приняли вид:

$$q_x = \text{const}, \quad x = \nu + 1, \dots, n.$$

Тогда остальные координаты описывают движение системы по «поверхности» (гиперповерхности). Наличие ограничивающих условий влечёт за собой в классической механике два утверждения (в дальнейшем латинские индексы пробегают значения от 1 до ν , греческие — от $\nu + 1$ до n):

$$q_x = c_x = \text{const} \quad (23)$$

и получающееся отсюда при помощи дифференцирования по времени

$$\dot{q}_x = 0. \quad (23a)$$

На основании этих двух условий можно дифференциальные уравнения классической механики освободить от излишних координат. Благодаря этому

¹⁾ Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 748 (1926), уравнение (31).

при дальнейшем рассмотрении принимаются во внимание лишь внутренние особенности поверхности, определяемой дополнительными условиями. Прежде всего перенесём указанный ход рассуждений без изменения на волновую механику.

Мы будем исходить из общей n -мерной квадратичной формы для кинетической энергии (9). Однако теперь мы будем её обозначать через T_q^* . Расписанная более подробно (знак суммирования опускаем) эта форма гласит:

$$T_q^* = \frac{1}{2} g_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l + g_{k\lambda} \dot{q}_k \dot{q}_\lambda + \frac{1}{2} g_{\lambda\lambda} \dot{q}_\lambda \dot{q}_\lambda. \quad (24a)$$

Если мы перейдём на поверхность, определённую дополнительными условиями, то вследствие (23a) получим:

$$T_q = \frac{1}{2} g_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l. \quad (24b)$$

На основании общего определения импульса (12), принимая во внимание (23a), для $k \leq \nu$ как из (24a), так и из (24b) найдём:

$$p_k = f_{kl} \dot{q}_l \text{ с } g_{kl} = f_{kl}. \quad (25)$$

Обозначение f_{kl} введено для того, чтобы более отчётливо подчеркнуть то обстоятельство, что мы имеем теперь дело с ν -мерным многообразием гиперповерхностей. Для определения p_x в случае $x > \nu$ мы должны воспользоваться (24a). Это даёт:

$$p_x = g_{kx} \dot{q}_k \neq 0. \quad (25a)$$

Для того чтобы преобразовать T_q в T_p , можно использовать либо (24a), либо (24b). В первом случае преобразование выполняется до того, как совершён переход к поверхностям $q_x = \text{const}$. Так же как и в (13), в этом случае получим:

$$T_p^* = \frac{1}{2} g^{kl} p_k p_l + g^{k\lambda} p_k p_\lambda + \frac{1}{2} g^{\lambda\lambda} p_\lambda p_\lambda. \quad (26)$$

Во втором случае необходимо прежде всего (25) разрешить относительно \dot{q} . Если через f^{kl} обозначим поделённые на $|f_{kl}|$ миноры f_{kl} , то имеют место равенства

$$p_k f^{km} = f_{kl} f^{km} \dot{q}_l = \dot{q}_m. \quad (27)$$

Подставляя эти равенства в (24b), найдём:

$$T_p = \frac{1}{2} f^{mn} p_m p_n. \quad (28)$$

На поверхности, определяемой дополнительными условиями, величины T^* и T должны быть равны друг другу. Поэтому, если мы заменим величины p_x в (26) через \dot{q} из (25a) и последние — через p_k по (27):

$$p_x = g_{ix} f^{kl} p_k, \quad (29)$$

то получим возможность сравнением коэффициентов в (26) и (27) установить следующее соотношение между f^{kl} и g^{kl} :

$$f^{kl} = g^{kl} + g^{k\lambda} g_{\lambda m} f^{ml} + g^{\lambda\lambda} g_{\lambda m} f^{mk} g_{\lambda n} f^{nl}. \quad (30)$$

Поэтому в общем случае должно быть:

$$g^{kl} \neq f^{kl}.$$

Теперь в зависимости от того, отождествим ли мы квадратичную форму T_p в (16) с T_p^* в (26) или с T_p в (28), получим два различных волновых уравнения. Однако лишь уравнение, получающееся при последнем отождествлении, удовлетворяет требованию, чтобы оно зависело лишь от внутренних особенностей поверхностей, т. е. только от величин f^{ki} . Поэтому в качестве волнового уравнения в согласии с (28) постулируется следующее уравнение:

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial q_k} f^{ki} D' \frac{\partial \psi}{\partial q_i} + 2D'(W - V)\psi = 0, \quad (31)$$

где $D' = 1/\sqrt{\Delta'}$ и Δ' — дискриминант квадратичной формы (28).

Строго говоря, с точки зрения волновой механики проведенные рассуждения несостоятельны. Точное определение координат q_x по (23) влечёт за собой по соотношению неопределённости полную неопределённость сопряжённых этим координатам импульсов p_x и поэтому также q_x . Поэтому, если мы требуем выполнения (23), равенства (23а) не могут более считаться точными.

Поэтому необходимо обратиться к другому приёму, чтобы получить волновое уравнение, не зависящее от лишних координат q_x . С этой целью рассмотрим полное n -мерное уравнение Шредингера (16), в котором T_p заменено через T_p^* из (26). Разделяя в этом уравнении свободные координаты q_k и излишние координаты q_x , получим:

$$\hbar^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial q_k} Dg^{ki} \frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{\partial}{\partial q_k} Dg^{k\lambda} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} + \frac{\partial}{\partial q_x} Dg^{x\lambda} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} + \frac{\partial}{\partial q_x} Dg^{x\lambda} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \right\} \psi + 2D(W - V_1 - V_2)\psi = 0. \quad (32)$$

Потенциальная энергия V здесь разбита на две части: V_1 и V_2 . Часть V должна быть «запирающим потенциалом», который обеспечивает, чтобы вероятность нахождения системы была бы отлична от нуля лишь на поверхностях $q_x = c_x$. Для того чтобы достигнуть этого, нужно, чтобы на этих поверхностях V_2 имело вид бесконечно узкой ямы. Глубина этой ямы должна быть бесконечно большой, так как в противном случае благодаря туннельному эффекту отдельные частицы могли бы покинуть поверхность $q_x = c_x$. Часть V_1 должна быть медленно изменяющимся потенциалом в обычном смысле.

Попробуем удовлетворить уравнению (32) при помощи следующей подстановки:

$$\psi = \psi_1(q_k) \psi_2(q_x). \quad (33)$$

Функция ψ_2 при этом существенно определяется «запирающим потенциалом» V_2 ; следовательно, должно быть:

$$\left. \begin{aligned} \psi_2 = 0 & \text{ для } q_x \neq c_x, \\ \psi_2 = \infty & \text{ для } q_x = c_x. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Конечно, порядок обращения в бесконечность должен быть выбран таким образом, чтобы норма ψ_2 осталась конечной. Функция ψ_1 есть, напротив, медленно изменяющаяся функция.

Для того чтобы разделение (33) было возможно, очевидно необходимо, чтобы те члены в (32), которые содержат как $\partial/\partial q_k$, так и $\partial/\partial q_x$, обратились в нуль. Для этого надо потребовать, чтобы

$$g^{kx} = 0. \quad (35)$$

Это ввиду (8) означает, что поверхности $g_k = \text{const}$ должны быть ортогональны к поверхностям $q_x = \text{const}$.

При подходящем выборе V_2 (см. примеры ниже) теперь уравнение (32) может быть разделено на два уравнения:

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial q_k} Dg^{kl} \frac{\partial \psi_1}{\partial q_l} + 2D(W_1 - V_1)\psi_1 = 0, \quad (36)$$

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial q_x} Dg^{x\lambda} \frac{\partial \psi_2}{\partial q_\lambda} + 2D(W_2 - V_2)\psi_2 = 0, \quad (37)$$

где

$$W = W_1 + W_2.$$

Излишние переменные q_x в (36) могут быть заменены их значением на поверхности, равным c_x . Ошибка, которая при этом вносится в решение при $q_x \neq c_x$, не играет роли, так как для $q_x \neq c_x$ полная собственная функция ввиду наличия множителя $\psi_2(q_x)$ всё равно обращается в нуль. Следовательно, уравнение (36) описывает движение системы по поверхности, определяемой дополнительными условиями, уравнение (37) даёт произвольно быстрые осцилляции относительно поверхности, которые появляются благодаря соотношению неопределённостей.

Мы не будем далее исследовать весьма непростые условия возможности такого разделения¹⁾, а рассмотрим лишь вопрос, совпадает ли уравнение (36) с уравнением (31). Для совпадения необходимо потребовать с точностью до не зависящего от q_k множителя пропорциональности

$$f^{kl} = g^{kl}, \quad (I)$$

$$\dot{D} = D'. \quad (II)$$

Требование (I) было бы согласно (30) выполнено, если бы в (35) мы вместо исчезновения g^{kx} потребовали исчезновения g_{kx} . Однако можно показать, что последнее следует из предыдущего. Величины g_{kx} выражаются через дополнения к g^{kx} , которые получаются из полной n -мерной схемы g^{km} вычёркиванием k -й строки и x -го столбца. Эта схема на основании (35) имеет следующий вид:

$$|g^{km}| = \begin{vmatrix} g^{kl} & \vdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \vdots & g^{x\lambda} \end{vmatrix}. \quad (38)$$

При указанном вычёркивании нули в нижнем левом поле сохраняются и обуславливают обращение в нуль рассматриваемых дополнений. Следовательно, если условие (35) выполнено, то и требование (I) удовлетворено²⁾.

Дискриминант Δ n -мерной квадратичной формы (26) распадается, согласно (38), на произведение двух детерминантов $|g^{kl}|$ и $|g^{x\lambda}|$. Для первого детерминанта на рассматриваемой поверхности, используя обозначение

¹⁾ Н. Р. Robertson, Mathem. Ann. 98, 749 (1928).

²⁾ Требование (I) много слабее (35), так как оно требует исчезновения g_{kx} лишь на поверхности, а не, как (35), во всём конфигурационном пространстве. Это обращение в нуль может быть достигнуто без изменения хода линий q_k на поверхности; можно распорядиться пока ещё произвольным продолжением поверхностей q_k вне рассматриваемой поверхности, определяемой дополнительными условиями. Следовательно, требование (I) выполнимо всегда, даже тогда, когда справедливость уравнения (35) в конфигурационном пространстве прямо не доказана.

Δ' из (31), можно написать $|g^{ki}| = |f^{ki}| = \Delta'$. Следовательно, имеем:

$$\Delta = \Delta' |g^{x\lambda}|.$$

Отсюда на основании (20) следует:

$$D = \frac{D'}{\sqrt{|g^{x\lambda}|}}. \quad (39)$$

Следовательно, для того чтобы на поверхности величина D могла быть заменена через D' , детерминант $|g^{x\lambda}|$ должен быть независим от q_k . Это достигается наложением более жёсткого требования:

$$g^{x\lambda} \text{ независимы от } q_k. \quad (40)$$

Если требование (40) выполнено, то соседние поверхности $q_x = \text{const}$ отстоят от рассматриваемой поверхности, определяемой дополнительными условиями, на равных расстояниях (эквидистантно). Введённый выше «запирающий потенциал» V_2 по соображениям разделения переменных должен быть функцией лишь переменных q_x и независим от q_k , так что потенциальная яма, осцилляции в которой проходят по уравнению (37), должна иметь везде одинаковую ширину.

ПРИМЕРЫ

1. Ротатор в пространстве. Ротатор в пространстве мы рассмотрели в гл. 1, стр. 37, записав волновое уравнение в пространственных полярных координатах и положив в нём $r = a$, $\frac{\partial}{\partial r} = 0$. Для обоснования этого с точки зрения волновой механики не очевидного приёма сошлёмся на дополнение 10. Здесь нам надо убедиться, что при принятых ранее условиях новые требования (I) и (II) выполнены.

Роль q_k в рассматриваемом случае играют углы ϑ , φ , роль величины q_x — остающийся постоянным радиус r . Квадратичные формы T_p^* и T_p из (26) и (28) имеют вид:

$$2mT_p^* = \frac{1}{r^2} p_\vartheta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} p_\varphi^2 + p_r^2, \quad (41)$$

$$2mT_p = \frac{1}{r^2} p_\vartheta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} p_\varphi^2. \quad (42)$$

Следовательно, схема коэффициентов g^{ki} запишется следующим образом (отвлекаясь от множителя $2m$):

$$g^{ki} = \begin{vmatrix} f^{ki} & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \text{где } f^{ki} = \begin{vmatrix} \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \end{vmatrix}. \quad (43)$$

То обстоятельство, что в левом верхнем углу (43) стоят величины f^{ki} , т. е. коэффициенты формы (42), отвечает требованию (I), появление единицы в правом нижнем углу означает, что условие (40), а следовательно, также и требование (II) выполнены. Следовательно, мы имели право образовать волновое уравнение ротатора [уравнение (18), стр. 37] по способу Шредингера [уравнение (31) настоящего дополнения]. «Запирающий потенциал», так же как и в (35), считается функцией только r , причём экvipотенциальные поверхности $V_2 = \text{const}$ становятся эквидистантными.

2. Плоская проблема Кеплера. Эта проблема была рассмотрена в «волномеханическом дополнительном томе» ¹⁾ в цилиндрических координатах r, φ, z , причём дополнительные условия имели вид: $z = \text{const}, \frac{\partial}{\partial z} = 0$. Следовательно, $q_x = z, q_k = r, \varphi$. Поэтому вместо схемы (43) получается следующая схема:

$$g^{ki} = \begin{vmatrix} f^{ki} & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{с} \quad f^{ki} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} \end{vmatrix}. \quad (44)$$

Требования (I) и (II) снова удовлетворены. «Запирающий потенциал» имеет вид $V_2(z)$, и волновое уравнение согласно (31) или (36) запишется следующим образом:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W_1 - V_1(r)) \psi = 0. \quad (45)$$

Можно также попробовать решить ту же задачу в пространственных полярных координатах с дополнительными условиями $\varphi = 0$ (движение в полуплоскости, ограниченной значениями углов $\vartheta = 0$ и $\vartheta = \pi$). Координаты q_k следовало бы в этом случае отождествить с r, ϑ и лишнюю координату q_x — с φ . Тогда вместо (42) получается, что

$$2mT_p = p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\vartheta^2, \quad (46)$$

и схема коэффициентов (43) записывается в следующем виде:

$$g^{ki} = \begin{vmatrix} f^{ki} & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \end{vmatrix} \quad \text{с} \quad f^{ki} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} \end{vmatrix}. \quad (47)$$

Требование (I), именно $g^{ki} = f^{ki}$, и теперь удовлетворено; соответствующее волновое уравнение

$$\frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V_1 - V_2) \psi = 0$$

введением «запирающего потенциала»

$$V_2 = \frac{\Phi(\varphi)}{r^2 \sin^2 \vartheta} \quad (48)$$

может быть разделено на два уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \vartheta \frac{\partial \psi_1}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial \psi_1}{\partial \vartheta} + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin \vartheta (W - V_1) \psi_1 - \frac{\lambda}{\sin \vartheta} \psi_1 = 0 \quad (49)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \varphi^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \Phi(\varphi) \psi_2 + \lambda \psi_2 = 0, \quad (50)$$

где λ — постоянная разделения.

Однако уравнение (49) существенно отлично от (45). Это произошло потому, что требование (II) не выполнено. Действительно, значение g^{xx} , даваемое (47), именно:

$$g^{xx} = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta},$$

противоречит содержащемуся в (40) требованию независимости от q_k (в дан-

¹⁾ См. Зоммерфельд, Волновая механика, ГТТИ, 1933, стр. 76. (Прим. ред.)

ном случае от r , θ). В соответствии с этим эквипотенциальные поверхности, получающиеся из (48), не являются эквидистантными; потенциальная яма V_2 в различных точках поверхности, определяемой дополнительными условиями, имеет различную ширину.

Отсюда видно, что уравнение (49) не является корректной формулировкой плоской проблемы Кеплера. На этом примере видно значение требований (I) и (II), при помощи которых надо уточнить получаемое на основании общих соображений механики уравнение (31).

3. Вращение твёрдого тела. В конце гл. II, § 12, в качестве независимых координат q_k вращательных степеней свободы были использованы углы Эйлера, определение которых дано на стр. 135. Условие неизменности расстояния между какими-либо двумя точками P_m и P_n системы может быть записано в виде:

$$\rho_{mn} = (x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2 + (z_m - z_n)^2 = \text{const.} \quad (51)$$

Величины ρ_{mn} рассматриваются как лишние координаты. Градиент от этих координат, указанный в равенстве (8), взятый в пространстве ζ -координат, имеет шесть отличных от нуля компонент; именно:

$$\begin{aligned} \text{Grad } \rho_{ik} = 0, 0, 0, \dots, \frac{2}{\sqrt{m_i}}(x_i - x_k), \frac{2}{\sqrt{m_i}}(y_i - y_k), \frac{2}{\sqrt{m_i}}(z_i - z_k), \\ \frac{-2}{\sqrt{m_k}}(x_i - x_k), \frac{-2}{\sqrt{m_k}}(y_i - y_k), \frac{-2}{\sqrt{m_k}}(z_i - z_k), 0, 0, \dots \quad (51a) \end{aligned}$$

Величины g^{ik} , входящие в (40), получаются отсюда в следующем виде:

$$\begin{aligned} g^{ik} = (\text{Grad } \rho_{ik}, \text{Grad } \rho_{im}) = \\ = \begin{cases} 0, & \text{когда } i, k, l, m \text{ различны;} \\ \frac{4}{m_k} \{ (x_i - x_k)(x_i - x_k) + \dots \} = \frac{4}{m_k} \overline{p_i p_k p_i p_k} \cos(p_i p_k p_i) & \text{для } k = m; \\ \left(\frac{4}{m_i} + \frac{4}{m_k} \right) \{ (x_i - x_k)^2 + \dots \} = 4 \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_k} \right) \overline{p_i p_k^2} & \text{для } i = l, k = m. \end{cases} \end{aligned}$$

Эти величины не зависят от q_k , как этого требует условие (40) (постоянство расстояний и углов!).

Следовательно, требование (II) выполнено и в качестве «запирающего потенциала» V_2 может быть взята функция только координат (51). В данном случае непосредственно видно, что осцилляции у поверхностей, определяемых дополнительными условиями, происходят независимо от положения тяжёлого тела в пространстве, т. е. независимо от углов Эйлера.

То, что требование (I) всегда выполнено, было указано в примечании на стр. 651. Следовательно, мы имели право написать волновое уравнение молекулы-волчка в (II.12.8) по шредингеровскому рецепту (36).

Относительно более точного исследования затронутых в этом дополнении вопросов можно обратиться к двум работам Велькера¹⁾.

11. К ДОКАЗАТЕЛЬСТВУ ТЕОРЕМЫ О ЦЕНТРЕ ТЯЖЕСТИ, ТЕОРЕМЫ ПЛОЩАДЕЙ И Т. Д.

К гл. III, § 2

Покажем, исходя из выражений (I ρ), (II ρ) и (III ρ) на стр. 148, что имеет место следующее равенство:

$$\Delta u \text{ grad } u^* + \Delta u^* \text{ grad } u = \text{div } T. \quad (1)$$

¹⁾ Н. Welker, Mathem. Ann. 113, 304 (1936) и Zs. f. Phys. 101, 95 (1936).

Здесь через T обозначен симметричный тензор¹⁾ с компонентами

$$T_{ik} = \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u^*}{\partial x_k} + \frac{\partial u^*}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_k} - \delta_{ik} \sum_j \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial u^*}{\partial x_j}, \quad (2)$$

где i, k, j принимают значения 1, 2, 3, а под x_1, x_2, x_3 понимаются x, y, z . Символом δ_{ik} обозначен известный единичный тензор. Под $\text{div } T$ понимается вектор, i -я компонента которого даётся суммой

$$\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} T_{ik},$$

которая, согласно (2), может быть записана в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} \sum_k \frac{\partial^2 u^*}{\partial x_k^2} + \frac{\partial u^*}{\partial x_i} \sum_k \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} + \sum_k \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial u^*}{\partial x_k} + \sum_k \frac{\partial^2 u^*}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial u}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial u^*}{\partial x_k}.$$

В последнем члене учтено значение δ_{ik} и проведена замена

$$\delta_{ik} \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \text{ через } \frac{\partial}{\partial x_i},$$

а также индекс суммирования j в (2) заменён для удобства через k . Выполнение дифференцирования в этом последнем члене непосредственно показывает, что этот член сокращается с двумя предыдущими. Но два первых члена тождественны с i -й компонентой левой части равенства (1). Тем самым равенство (1) доказано.

Но тем самым также показано, что выражение (Iг) на стр. 148 обращается в нуль, что, как мы видели, ведёт к волновомеханической теореме центра тяжести, ибо очевидно, что, отбрасывая интегралы по поверхностям, отодвигаемым на бесконечность, мы имеем равенство

$$\int \text{div } T \, d\tau = \sum \int \frac{\partial}{\partial x_k} T_{ik} \, d\tau = 0. \quad (3)$$

Далее рассмотрим выражение (IIг), стр. 148, интеграл которого на основании (1) запишется в виде:

$$I = \int [r, \text{div } T] \, d\tau.$$

Рассматривая компоненту векторного произведения, характеризуемую индексами ik , получим:

$$I = \int \left\{ x_i \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} T_{kj} - x_k \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} \right\} d\tau.$$

При проведении интегрирования по частям все члены, для которых не выполняются равенства $j=i$ и $j=k$, обращаются в нуль и остаётся

$$I = - \int \{ T_{ki} - T_{ik} \} \, d\tau = 0 \quad (4)$$

ввиду симметрии тензора. Тем самым также доказано, что выражение (IIг), стр. 148, исчезает, что, как мы видели, имеет своим следствием теорему площадей волновой механики.

Перейдём, наконец, к интегралу выражения (IIIг):

$$I = \int (r \, \text{div } T) \, d\tau. \quad (5)$$

¹⁾ Этот тензор тесно связан с тензором S , введённым Шредингером в *Ann. d. Phys.* 82, 265 (1927).

Интегрированием по частям этот интеграл преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} - \int \sum T_{ii} d\tau &= - \int \left\{ 2 \sum \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u^*}{\partial x_i} - 3 \sum \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial u^*}{\partial x_j} \right\} d\tau = \int \sum \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial u^*}{\partial x_i} d\tau = \\ &= - \int u \Delta u^* d\tau = - \int u^* \Delta u d\tau. \end{aligned}$$

Это согласуется с результатом относительно (III), приведшим к теореме вириала волновой механики.

12. ДОПОЛНЕНИЯ К ТЕОРЕМАМ ОБ ОПЕРАТОРАХ МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

К заключению гл. III, § 3

Здесь дело идёт о собственных значениях операторов M_z и M^2 , которые, как это было показано, могут быть одновременно приведены к диагональному виду.

С этой целью рассмотрим систему из N электронов в произвольном расположении x_k, y_k, z_k и подвергнем её виртуальному повороту как целого, сохраняя взаимные расстояния r_{ik} электронов и их расстояния от ядра неизменными. Покажем, что виртуальное изменение, которое претерпевает ψ благодаря такому повороту, определяется именно оператором M посредством равенства

$$\delta\psi = \frac{i}{\hbar} (M\delta\gamma)\psi, \quad (1)$$

где $\delta\gamma$ — угол виртуального поворота. Если этот поворот совершается, например, вокруг оси z , то $(M\delta\gamma)$ равно $M_z\delta\gamma$. При этом, как и на стр. 153 [равенство (17)], M_z распадается на части, зависящие от координат каждой отдельной частицы:

$$M_z = \sum M_{zk}, \quad \frac{i}{\hbar} M_{zk} = x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k}. \quad (2)$$

Для того чтобы доказать (1), выпишем изменения, которые претерпевают координаты x_k, y_k, z_k под действием поворота $\delta\gamma$ вокруг оси z :

$$\delta x_k = -y_k \delta\gamma, \quad \delta y_k = +x_k \delta\gamma, \quad \delta z_k = 0 \quad (3)$$

и образуем вклад k -й частицы $\delta\psi_k$ в $\delta\psi$:

$$\delta\psi_k = \frac{\partial\psi}{\partial x_k} \delta x_k + \frac{\partial\psi}{\partial y_k} \delta y_k + \frac{\partial\psi}{\partial z_k} \delta z_k = \left(-y_k \frac{\partial\psi}{\partial x_k} + x_k \frac{\partial\psi}{\partial y_k} \right) \delta\gamma. \quad (4)$$

Но на основании (2) это равно

$$\delta\psi_k = \frac{i}{\hbar} M_{zk} \delta\gamma.$$

Произведя суммирование по всем $\delta\psi_k$, мы получим равенство (1).

Выразим, далее, операторы M не через $3N$ координат частиц системы, а через три координаты, соответствующие трём степеням свободы системы точек, рассматриваемой как твёрдая система. В качестве этих трёх координат, так же как и в гл. II, § 12, возьмём углы Эйлера ϑ, φ, χ (ϑ — вращение вокруг «линии узлов», φ — вращение вокруг «вертикали» или оси z , χ — вращение вокруг «фигурной оси» или оси Z). Так как положение каждой точки x_k, y_k, z_k может быть выражено через ϑ, φ, χ , то можно

написать:

$$\psi(x_k, y_k, z_k) = \Psi(\vartheta, \varphi, \chi). \quad (5)$$

Тогда при рассматриваемом виртуальном повороте имеем:

$$\delta\psi = \delta\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} \delta\vartheta + \frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} \delta\varphi + \frac{\partial\Psi}{\partial\chi} \delta\chi. \quad (6)$$

В частном случае поворота вокруг оси z $\delta\vartheta = \delta\chi = 0$ и $\delta\varphi$ в (1) совпадает с $\delta\varphi$. Следовательно, на основании (1), (5) и (6) найдём:

$$M_z\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\Psi}{\partial\varphi}. \quad (7)$$

Это есть равенство (36), стр. 157, из которого там в равенстве (39) было сделано заключение о целочисленности квантового числа M . Написанием Ψ вместо ψ нами подчёркнуто, что степени свободы движения рассматриваемой системы точек ограничены условием неизменяемости расстояний.

С другой стороны, нам надо выразить через углы Эйлера выражения $M_x\psi$ и $M_y\psi$. Для этого нужна некоторая кинематическая подготовка.

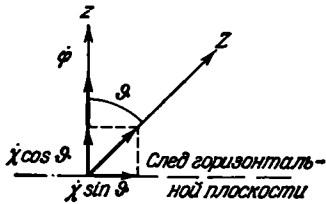


Рис. 58а. Проекция вектора вращения $\omega = (\dot{\vartheta}, \dot{\varphi}, \dot{\chi})$ на вертикаль (ось z).

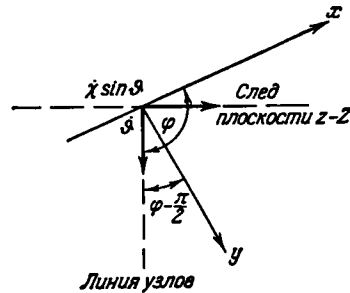


Рис. 58б. Проекция вектора вращения ω на горизонтальную плоскость (плоскость x, y).

В гл. II, § 12 [равенства (3а, б, в), а также рис. 14а, 14б] угловая скорость ω была разложена, с одной стороны, по осям XYZ , движущимся вместе с телом, а с другой стороны, по осям углов Эйлера: линии узлов, вертикали и фигурной линии. Соответствующие компоненты были $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ и соответственно $\dot{\vartheta}, \dot{\varphi}, \dot{\chi}$. Теперь нам надо разложить ω по закреплённым в пространстве осям x, y, z и $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ выразить через $\dot{\vartheta}, \dot{\varphi}, \dot{\chi}$. Для этого воспользуемся рис. 58а и 58б. На рис. 58а, так же как на рис. 14а, представлена плоскость, проходящая через «вертикаль» (ось z) и «фигурную ось» (ось Z). В направлении «вертикали» лежит угловая скорость $\dot{\varphi}$, в направлении оси Z лежит угловая скорость $\dot{\chi}$; компонента $\dot{\vartheta}$ лежит в направлении линии узлов и, следовательно, расположена вертикально к нарисованной плоскости. Таким образом, проекция вектора вращения на ось z равна

$$\omega_z = \dot{\varphi} + \dot{\chi} \cos \vartheta. \quad (8а)$$

На рис. 58а обозначен «след горизонтальной плоскости». Проекция вектора вращения на этот след равна

$$\omega_s = \dot{\chi} \sin \vartheta.$$

На рис. 58б представлена горизонтальная плоскость со следом нарисованной на рис. 58а плоскости ($z-Z$). В плоскости, изображённой на рис. 58б, лежит компонента $\dot{\theta}$ вектора вращения в направлении линии узлов, т. е. перпендикулярно к названному следу. Поэтому проекция вектора вращения на горизонтальную плоскость равна

$$\omega_H^2 = \dot{\theta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\chi}^2. \quad (8б)$$

В настоящий момент нам нужны лишь проекции ω на оси x и y , которые образуют углы φ и $\varphi - \frac{\pi}{2}$ с осью узлов (см. рис. 58б). Эти проекции равны

$$\left. \begin{aligned} \omega_x &= \cos \varphi \dot{\theta} + \sin \varphi \sin \vartheta \dot{\chi}, \\ \omega_y &= \sin \varphi \dot{\theta} - \cos \varphi \sin \vartheta \dot{\chi}, \end{aligned} \right\} \quad (8в)$$

откуда, конечно, после возведения в квадрат и сложения получается снова (8б). При сравнении (8а, б, в) с прежними равенствами (3а, б, в) на стр. 136 заметим ещё, что эти равенства совпадают друг с другом, если поменять местами φ и χ .

Переходя от угловых скоростей вращения $\omega_x, \dots, \dot{\theta}, \dots$ к виртуальным поворотам $\delta\gamma_x, \dots, \delta\theta, \dots$, перепишем в соответствии с этим (8а, в) в виде:

$$\left. \begin{aligned} \delta\gamma_x &= \cos \varphi \delta\theta + \sin \varphi \sin \vartheta \delta\chi, \\ \delta\gamma_y &= \sin \varphi \delta\theta - \cos \varphi \sin \vartheta \delta\chi, \\ \delta\gamma_z &= \delta\varphi + \cos \vartheta \delta\chi. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Подстановка в равенство (1) даёт:

$$\delta\psi = \delta\Psi = \frac{i}{\hbar} \{ (\cos \varphi M_x + \sin \varphi M_y) \delta\theta + \\ + [\sin \vartheta (\sin \varphi M_x - \cos \varphi M_y) + \cos \vartheta M_z] \delta\chi + M_z \delta\varphi \} \Psi. \quad (10)$$

Сравнивая это с (6), ввиду произвольности $\delta\theta, \delta\chi, \delta\varphi$, получим:

$$\begin{aligned} \cos \varphi M_x + \sin \varphi M_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}, \\ \sin \vartheta (\sin \varphi M_x - \cos \varphi M_y) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \chi} - \cos \vartheta M_z, \\ M_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Последнее равенство нам известно уже из (7). Первые два равенства после подстановки значения M_z преобразуются к виду:

$$\left. \begin{aligned} \cos \varphi M_x + \sin \varphi M_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}, \\ \sin \vartheta (\sin \varphi M_x - \cos \varphi M_y) &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \chi} - \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Отсюда при помощи умножения одного из равенств на $\pm i$ и сложения получим:

$$M_x \mp i M_y = \frac{\hbar}{i} e^{\mp i\varphi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i}{\sin \vartheta} \left(\frac{\partial}{\partial \chi} - \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}.$$

Перемножая эти оба оператора и принимая во внимание (III.3.33), найдём:

$$-\frac{1}{\hbar^2} (M_x^2 + M_y^2) = \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - 2 \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \varphi} + \cos^2 \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (12)$$

Далее, учитывая (7), будем иметь:

$$-\frac{1}{\hbar^2} M^2 = \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - 2 \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \varphi} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (13)$$

Однако из второго уравнения (35), стр. 157, нам известно, что ψ удовлетворяет следующему уравнению: $M^2\psi = \Delta\psi$. Учитывая это, получим из (13) следующее дифференциальное уравнение для ψ :

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - 2 \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \varphi} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\Lambda}{\hbar^2} \right\} \psi = 0. \quad (14)$$

Это уравнение совпадает с уравнением (8), стр. 138, если там положить $J=K$ и $2JW=\Delta$. Поэтому из (21) на стр. 140, написав там вместо j букву L , получим:

$$\Delta = L(L+1)\hbar^2.$$

Число L при этом, так же как и прежнее j , является положительным целым числом, «азимутальным квантовым числом», которое теперь уже относится не к отдельному электрону, как это было со шредингеровским l , а к системе N электронов. Это число можно назвать полным орбитальным квантовым числом, так как оно связано с полным орбитальным моментом M^2 всех электронов. В спектроскопии это число было впервые введено Ресселом и Саундерсом (см. т. I, гл. VIII, § 3).

Применённый выше метод соответствует целиком выводу теоремы площадей в обычной механике из «принципа виртуальной работы» для системы из точек, в которой имеются только внутренние силы. Там тоже вводится виртуальный поворот системы, при котором конфигурация предполагается неизменной, несмотря на то, что система может быть подвижна внутри себя, и благодаря исчезновению виртуальной работы делается заключение о сохранении момента вращения вокруг оси виртуального поворота. Различие заключается лишь в том, что в механике момент вращения постоянен по направлению и величине, или, что то же самое, его три компоненты M_x , M_y , M_z постоянны. Вместо этого в волновой механике утверждение о постоянстве может относиться лишь к одной из этих компонент и к M^2 , так как лишь эти две величины одновременно коммутируют с гамильтонианом H (стр. 157).

Наконец, рассмотрим гораздо более простой и для волновой механики особенно важный случай одной частицы P (проблема Кеплера!). Так как в этом случае ось симметрии можно направить через P , то эйлеровский угол χ теряет своё физическое значение и во всех формулах надо положить:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} = 0. \quad (15)$$

Оба других угла Эйлера ϑ , φ превращаются в обычные полярные углы ¹⁾ точки P в координатной системе (r, ϑ, φ) .

¹⁾ Для того чтобы эти углы привести в соответствие с обычным определением надо φ заменить через $\varphi + \frac{\pi}{2}$ (см. рис. 586), что и сделано в (16).

Теперь в согласии с определением M в (2) запишем:

$$\frac{i}{h} M = [r, \text{grad}],$$

где r — радиус-вектор точки P . Тогда, учитывая (15), из (11), (7) и (13) получим:

$$[r \text{ grad}] = \begin{cases} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos \varphi \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \cos \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial \varphi}; \end{cases} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} [r \text{ grad}]^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \\ &= \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Конечно, эти формулы могут быть выведены непосредственно без употребления углов Эйлера, что более просто.

13. ДВУХРЯДНЫЕ И ЧЕТЫРЁХРЯДНЫЕ МАТРИЦЫ. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГИПЕРКОМПЛЕКСНЫХ ЕДИНИЦ γ ЧЕРЕЗ МАТРИЦЫ

К гл. IV, § 5

Для того чтобы подвести под достаточно абстрактное матричное исчисление конкретную базу, мы введём матрицы в качестве геометрических операций над некоторыми вспомогательными переменными x . Эти операции выбираются такими, чтобы они обладали свойствами, аналогичными свойствам гиперкомплексных единиц γ . Когда это будет достигнуто, то использованием этих операций можно заменить использование гиперкомплексных единиц γ , т. е. γ будут представлены матрицами. Теперь же заметим, что используемые нами вспомогательные переменные x не имеют ничего общего с координатами точек пространства-времени релятивистской теории.

Начнём с тривиального случая одной единицы γ и одной переменной x . В этом случае γ должна удовлетворять лишь одному требованию: $\gamma^2 = 1$. Отсюда заключаем, что

$$\gamma = \pm 1.$$

Если γ рассматривать как оператор, действующий на переменную x , то $\gamma x = +x$ означает тождественное преобразование, $\gamma x = -x$ — отражение в нулевой точке, которое точку P переводит в $P_1 = -P$ (рис. 59а).

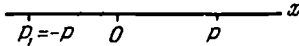


Рис. 59а. При отражении в точке O точка P переходит в P_1 (операция γ).

Далее рассмотрим случай двух операций, которые мы обозначим не через γ_1, γ_2 , а через σ_1, σ_2 , для того чтобы быть в согласии с ранее принятыми обозначениями. Эти операции действуют на две переменные x_1, x_2 . Операции σ_1, σ_2 должны удовлетворять тем же требованиям, которые предъявляются к γ_1, γ_2 , т. е.

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1, \quad (1a)$$

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 1. \quad (16)$$

Для того чтобы удовлетворить (1а), представим σ_1 и σ_2 с помощью отражений; σ_1 будем считать отражением относительно некоторой прямой A_1 , которая может быть взята в качестве оси x_2 ; σ_2 берётся в виде отражения относительно другой прямой, образующей с A_1 некоторый угол α (рис. 59б). Операция σ_1 переводит произвольную точку P в P_1 , а σ_2 — ту же точку P — в P_2 . Пусть комбинация операций $\sigma_1\sigma_2$ (сначала применяется операция σ_2 , затем σ_1) соответствует точке P_{12} , комбинация $\sigma_2\sigma_1$ — точке P_{21} . Углы, отсчитываемые от оси x_1 , которые образуют прямые, проведённые в эти точки из начала координат, даются следующими соотношениями, причём через φ обозначен угол, принадлежащий исходной точке P :

$$\begin{array}{ccccc} P & P_1 & P_2 & P_{12} & P_{21} \\ \hline \varphi & -\varphi & \varphi + 2(\alpha - \varphi) & -\varphi - 2(\alpha - \varphi) & -\varphi + 2(\alpha + \varphi) \end{array}$$

Требование (1а) равносильно требованию, чтобы P_{12} и P_{21} были относительно начала координат расположены с диаметрально противоположных сторон, т. е. чтобы соответствующие им углы отличались на π . Это даёт:

$$-\varphi + 2(\alpha + \varphi) + \varphi + 2(\alpha - \varphi) = 4\alpha = \pm \pi.$$

Следовательно, оси A_1 и A_2 должны образовывать друг с другом угол в 45° . Полученный результат однозначен с точностью до общего вращения осей в плоскости их расположения, так что не имеет значения, какую из осей обозначить через A_1 или A_2 . Очевидно, что условия (1б) при этих отражениях также выполнены.

Полученный результат напоминает об элементах симметрии в кристаллографии. Если мы говорим о «двумерном кристалле с квадратной элементарной ячейкой», то элементами симметрии в этом случае будут следующие: отражение относительно сторон и отражение относительно диагонали квадрата.

Выпишем теперь линейные преобразования, соответствующие операциям σ_1 и σ_2 . Пусть x_1, x_2 — координаты исходной точки P и x'_1, x'_2 — координаты полученной в результате преобразования точки P_1 и соответственно P_2 . Очевидно, при общепринятом способе написания имеем:

$$\sigma_1 \left\{ \begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x'_1 & 1 & 0 \\ x'_2 & 0 & -1 \end{array} \right. \quad \sigma_2 \left\{ \begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x'_1 & 0 & 1 \\ x'_2 & 1 & 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

Какая же схема соответствует последовательностям $\sigma_1\sigma_2$ и $\sigma_2\sigma_1$? Выясним этот вопрос сначала на примере произвольных преобразований:

$$A \left\{ \begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x'_1 & a_{11} & a_{12} \\ x'_2 & a_{21} & a_{22} \end{array} \right. \quad B \left\{ \begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x'_1 & b_{11} & b_{12} \\ x'_2 & b_{21} & b_{22} \end{array} \right.$$

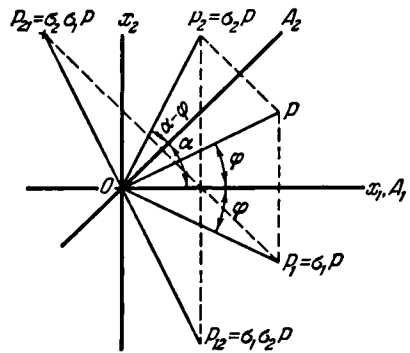


Рис. 59б. Точки P_1 и P_2 получаются из P при помощи отражения относительно осей A_1 и A_2 (операции σ_1 и σ_2), P_{12} и P_{21} — при помощи двукратного отражения (операции $\sigma_1\sigma_2$ и $\sigma_2\sigma_1$). Для того чтобы P_{12} и P_{21} были расположены диаметрально противоположно ($\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1$), нужно, чтобы угол между A_1 и A_2 был равен $\pi/4$.

Для того чтобы образовать AB , надо к точке x'_1, x'_2 , полученной в результате применения операции B , применить операцию A , в результате чего получится точка x''_1, x''_2 , а именно:

$$\begin{aligned}x''_1 &= a_{11}x'_1 + a_{12}x'_2 = a_{11}(b_{11}x_1 + b_{12}x_2) + a_{12}(b_{21}x_1 + b_{22}x_2) = \\ &= (a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21})x_1 + (a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22})x_2, \\ x''_2 &= a_{21}x'_1 + a_{22}x'_2 = a_{21}(b_{11}x_1 + b_{12}x_2) + a_{22}(b_{21}x_1 + b_{22}x_2) = \\ &= (a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21})x_1 + (a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22})x_2.\end{aligned}$$

Этот результат есть определение на стр. 162 «умножения матриц» для двумерного случая. Результирующая матрица AB образуется по следующему правилу: строчки A умножаются на столбцы B . Эта матрица даётся следующей схемой:

$$AB \left\{ \begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x''_1 & \sum a_{1k}b_{k1} & \sum a_{1k}b_{k2} \\ x''_2 & \sum a_{2k}b_{k1} & \sum a_{2k}b_{k2} \end{array} \right.$$

Очевидно, что применение этого правила к операциям σ_1, σ_2 даёт следующий результат (переменные x далее не нужны):

$$\sigma_1\sigma_2 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_2\sigma_1 = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -\sigma_1\sigma_2, \quad (3)$$

как того и требует (1а) и как это было уже установлено на рис. 596. Добавим к матрицам σ_1, σ_2 ещё матрицу $\sigma_3 = i\sigma_1\sigma_2$, которая также нормирована на единицу, т. е. с учётом (2) и (3) положим:

$$\sigma_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}. \quad (4)$$

Эти три матрицы для каждой пары индексов k, l удовлетворяют условиям:

$$\sigma_k\sigma_l = -\sigma_l\sigma_k, \quad (4a)$$

$$\sigma_k^2 = 1. \quad (4b)$$

Вследствие этого величины σ изоморфны спиновому оператору σ стр. 188 и на основании (7а) на стр. 205 отличаются от кватернионов i, j, k только нормировкой. Вводя ещё «единичную матрицу»

$$1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (4в)$$

мы в (4) и (4в) будем иметь матричное представление полной кватернионной группы.

Интересно заметить, что в случае трёх измерений не существует матриц с аналогичными свойствами (согласно дружескому сообщению Бохнера). Поэтому сразу же обратимся к матрицам с четырьмя строчками и столбцами и попытаемся их построить из двухрядных матриц.

Для достижения этой цели воспользуемся следующим приёмом: к двум из рассматриваемых четырёх переменных x_1, \dots, x_4 , например к x_1, x_2 , применим одну из рассмотренных ранее двумерных операций σ и аналогично к оставшимся двум другим переменным применим ту же или другую из операций σ . Две из получающихся в результате этого четырёхрядных

матриц имеют вид:

$$\gamma = \begin{vmatrix} \sigma_a & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix}, \quad \gamma' = \begin{vmatrix} \sigma'_a & 0 \\ 0 & \sigma'_b \end{vmatrix},$$

причём как под σ , так и под нулями понимаются двухрядные матрицы. По вышеуказанному правилу умножения, которое, как само собой разумеется, распространяется и на матрицы с произвольным числом рядов, получим:

$$\gamma^2 = \begin{vmatrix} \sigma_a^2 & 0 \\ 0 & \sigma_b^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1, \quad \gamma'^2 = 1, \quad (5a)$$

и

$$\gamma\gamma' = \begin{vmatrix} \sigma_a\sigma'_a & 0 \\ 0 & \sigma_b\sigma'_b \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} \sigma'_a\sigma_a & 0 \\ 0 & \sigma'_b\sigma_b \end{vmatrix} = -\gamma'\gamma. \quad (5b)$$

Тем самым доказано, что образованные указанным способом матрицы удовлетворяют требованиям, предъявляемым к γ . Поэтому остаётся лишь выбрать четыре таких γ , которые были бы независимы друг от друга. Четыре матрицы:

$$\gamma_1 = \begin{vmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{vmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{vmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix}, \quad (6)$$

в которых σ_a пробегает ряд значений (4) и (4в), а σ_b фиксировано, этому условию не удовлетворяют, поскольку вследствие $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$ [равенства (3) и (4)] имеет место следующее соотношение:

$$\gamma_1\gamma_2 = \begin{vmatrix} \sigma_1\sigma_2 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = i \begin{vmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = i \begin{vmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sigma_b \end{vmatrix} = i\gamma_3\gamma_4. \quad (7)$$

Требованию независимости удовлетворяют матрицы:

$$\gamma_1 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_b & 0 \end{vmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{vmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (8)$$

Эти γ отличаются от принятых Дираком¹⁾ и обозначенных через α величин лишь порядком следования и знаком. Связь между дираковскими величинами α и величинами γ в (8) даётся следующими соотношениями:

$$\alpha_1 = \gamma_2, \quad \alpha_2 = -\gamma_1, \quad \alpha_3 = \gamma_3, \quad \alpha_4 = \gamma_4.$$

Следовательно, на основании (4) и (8) в развёрнутом виде имеем:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, & \alpha_2 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \\ \alpha_3 &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, & \alpha_4 &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Следует обратить внимание на эрмитовский характер этих матриц (два члена, симметричных относительно главной диагонали, комплексно сопряжены).

¹⁾ В его первой, цитированной на стр. 186 работе о спине электрона.

Так же, как $\gamma_1, \dots, \gamma_4$, теперь можно представить и все произведения γ_i , а поэтому все 16 гиперкомплексных единиц через четырёхрядные матрицы, выполняя соответствующие перемножения. Так как самое общее гиперкомплексное число A может быть представлено в виде суммы этих единиц с коэффициентами a , являющимися обыкновенными числами, то это произвольное гиперкомплексное число A может быть представлено в виде четырёхрядной матрицы, имеющей вид:

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix}. \quad (10)$$

Поясним на этой схеме *редуцирующее* действие *делителя нуля*. Из предыдущего нам известны два делителя нуля:

$$\frac{1}{2}(1 + \gamma_4) \quad \text{и} \quad \frac{1}{2}(1 - \gamma_4).$$

В этих выражениях γ_4 надо заменить через матрицу из (8) и 1 — через единичную четырёхрядную матрицу. Тогда в результате введения обеих матриц получим:

$$\frac{1}{2}(1 + \gamma_4) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \frac{1}{2}(1 - \gamma_4) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (11)$$

Если умножить (10) на (11), то из 16 членов схемы (10) останутся отличными от нуля только восемь, а именно:

$$\frac{1}{2}A(1 + \gamma_4) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \frac{1}{2}A(1 - \gamma_4) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & a_{13} & a_{14} \\ 0 & 0 & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix}. \quad (11a)$$

В этом случае на стр. 210 мы говорили о степени редукции $1/2$. Ту же степень редукции имеет матрица

$$\frac{1}{2}(1 + i\gamma_{12}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (12)$$

Если теперь образовать произведение (11) и (12), то получится матрица, в которой только один элемент отличен от нуля:

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_1 &= \frac{1}{4}(1 + \gamma_4)(1 + i\gamma_{12}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \\ \Gamma_2 &= \frac{1}{4}(1 - \gamma_4)(1 + i\gamma_{12}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Поэтому в результате перемножения общей матрицы A с одной из последних матриц получается матрица, у которой все столбцы, за исключением одного, равны нулю, например:

$$A\Gamma_1 = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & 0 & 0 \\ 0 & a_{42} & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (13a)$$

Степень редукции равна $1/4$. В результате умножения на делитель нуля этого типа любое гиперкомплексное число рассматриваемого вида сводится к матрице с одним столбцом. То же самое относится к любой функции гиперкомплексных чисел рассматриваемого вида. В этом, собственно, и содержится основание того, что в обычном представлении теории Дирака говорят о «четырёх функциях Дирака» ψ_1, \dots, ψ_4 и о «четырёх дифференциальных уравнениях Дирака». В смысле схемы (13a) эти четыре функции часто записывают в виде «вертикальной матрицы»:

$$\begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}. \quad (14)$$

Тогда четыре уравнения Дирака проблемы Кеплера в форме (37) на стр. 250 получаются из (IV.7.1) формально как произведения основных матриц γ и этих «вертикальных матриц»¹⁾.

При систематическом построении четырёхрядных матриц рассматриваемого типа из двухрядных матриц полезной является общая теорема Клиффорда²⁾, которая при конкретизации на рассматриваемый случай гласит: исходя из кватернионного тела q и выбирая в нём коэффициенты элементов q не в виде обычных чисел, а снова в виде чисел кватернионного тела p , мы получим тело рассмотренных 16 единиц, при этом элементы p и q должны коммутировать между собой.

14. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП В ТЕОРИИ ДИРАКА

К гл. IV, § 3

Представленный на стр. 145 формализм требует завершения в смысле вариационного исчисления. Умножая равенство (1) упомянутой страницы на четырёхмерный элемент объёма

$$dT = dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 = d\tau dx_4 \quad (1)$$

и интегрируя по произвольной области G , получим справа величину C , которая зависит только от значений u , v на границе; для совершенно произвольных функций u и v имеют место соотношения

$$J = K + C, \quad (2)$$

$$J = \int v(\vec{L}u) dT, \quad K = \int (v\vec{M})u dT. \quad (3)$$

¹⁾ Отвлекаясь от нормировки ψ и от несущественных множителей $\pm i$, которые следует включить в определение ψ .

²⁾ См. прибавление к работе Франца, цитированной на стр. 215.

Величины u , v варьируются в предположении, что на границе $\delta u = 0$, $\delta v = 0$, в то время как внутри области δu и δv могут выбираться произвольно и совершенно независимо друг от друга. Вариационный принцип записываем в виде:

$$\delta J = 0, \quad (4)$$

что на основании (2) имеет следствием:

$$\delta K = 0. \quad (4a)$$

Из (3) получается:

$$\delta J = \int \delta v (\vec{L}u) dT + \int v (\vec{L}\delta u) dT = \int \delta v (\vec{L}u) dT + \int (v\vec{M}) \delta u dT.$$

Произведённое преобразование второго интеграла следует непосредственно из определения L и M в равенствах (IV.3.2 и 4). Ввиду произвольности δu , δv из (4) заключаем, что

$$(\vec{L}u) = 0, \quad (v\vec{M}) = 0.$$

К тому же самому результату привело бы и требование (4a). Следовательно, рассматриваемый вариационный принцип выделяет из всей совокупности пар функций u , v решения теории Дирака и представляет эту теорию в форме, симметричной относительно u , v .

Переходя к стационарному случаю, надо положить:

$$u = \psi e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad v = \chi e^{+\frac{iE}{\hbar}t},$$

где χ выводится из ψ по правилу, указанному на стр. 196. Тогда выражение $v(\vec{L}u)$ становится независимым от t . Следовательно, выбирая область G в виде цилиндра с осью по четвёртой оси координат с высотой, равной, например, единице, видим, что $\int dT$ переходит в $\int d\tau$, и из (2) получается:

$$J = \int \chi (\vec{L}_1\psi) d\tau - \frac{E}{\hbar c} \int \chi \gamma_4 \psi dt, \quad (5)$$

где L_1 получается из L путём выделения члена, содержащего производную по времени. На основании условия нормировки (IV.3.2) второй интеграл этого выражения равен вполне определённом заранее заданному редуцированному множителю Γ . Следовательно, если мы будем производить в (4) варьирование при дополнительном условии

$$\delta \int \chi \gamma_4 \psi d\tau = 0 \quad (5a)$$

(сохраняющаяся нормировка), то (4) сводится к следующему условию:

$$\delta J_1 = 0, \quad J_1 = \int \chi (\vec{L}_1\psi) d\tau. \quad (6)$$

Значения J_1 , которые соответствуют нормированным парам функции ψ , χ теории Дирака, являются экстремальными значениями. Эти экстремальные значения дают вместе с тем ряд собственных значений E , которые соответ-

ствуют ряду пар собственных функций ψ , χ . Из (5) с учётом нормировки ψ , χ следует:

$$E\Gamma = \hbar c J_1. \quad (7)$$

Следовательно, в (5) надо положить $J = 0$, принимая во внимание, что $L_u = 0$.

Изложенный здесь релятивистский вариационный принцип чрезвычайно похож на нерелятивистский принцип в дополнении 4, равенства (15а, б). Разумеется, что, прежде чем переходить к численным расчётам, необходимо умножением на редуцирующий множитель освободить равенство (7) от содержащихся в нём множителей γ .

Применение этого вариационного принципа разработано Свирлсом¹⁾.

15. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ДОПОЛНЕНИЯ К РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ПРОБЛЕМЕ КЕПЛЕРА

К гл. IV, § 7

А. Оператор $([r \text{ grad}], \gamma)$. Мы исходим из заключительных результатов дополнения 12, где выражение $[r \text{ grad}]$ было преобразовано к полярным координатам. Из равенства (16) этого дополнения следует:

$$\begin{aligned} [r \text{ grad}]_x \gamma_1 + [r \text{ grad}]_y \gamma_2 &= \\ &= \gamma_1 \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \gamma_2 \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\ &= \gamma_2 (\cos \varphi + \gamma_{12} \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \gamma_1 (\cos \varphi + \gamma_{12} \sin \varphi) \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (1)$$

и также

$$[r \text{ grad}]_z \gamma_3 = \gamma_3 \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2)$$

Нам необходимо применить операторы (1) и (2) к обоим членам (IV.7.27). Эти члены в отношении их зависимости от φ могут быть записаны, так же как и в (IV.7.26), в виде:

$$e^{\gamma_{12}\mu\varphi}, \quad \mu = \begin{cases} m - \frac{1}{2}, \\ -(m + \frac{1}{2}). \end{cases} \quad (3)$$

Следовательно, в этих обоих членах дифференцирование по φ может быть заменено умножением на $\gamma_{12}\mu$. Благодаря этому правая часть (2) переходит в выражение

$$\gamma_3 \frac{\partial}{\partial \varphi} = \gamma_3 \gamma_{12} \mu = \mu \tau, \quad \tau = \gamma_{123}. \quad (4)$$

а правая часть (1) принимает вид:

$$\gamma_2 e^{\gamma_{12}\mu\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - \mu \operatorname{ctg} \vartheta \right). \quad (5)$$

¹⁾ В. Swirls, Proc. Roy. Soc. 152, 625 (1935). Дело идёт о релятивистском обобщении метода самосогласованного поля Хартри—Фока.

Путём сложения и применения к $P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi}$ из (4) и (5) получается:

$$([r \operatorname{grad}], \gamma) P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} = \tau_\mu P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} + \gamma_2 e^{\gamma_{12}(\mu+1)\varphi} \left(\frac{d}{d\theta} - \mu \operatorname{ctg} \theta \right) P_n^\mu. \quad (6)$$

Принимая во внимание соотношение (I.3.166), справедливое как для положительных, так и для отрицательных значений μ (n пока принимается положительным):

$$2^n n! P_n^\mu(x) = \sin^\mu \theta \frac{d^{n+\mu}}{dx^{n+\mu}} (x^2 - 1)^n, \quad x = \cos \theta,$$

и дифференцируя его по θ , получим:

$$2^n n! \frac{d}{d\theta} P_n^\mu = \mu \cos \theta \sin^{\mu-1} \theta \frac{d^{n+\mu}}{dx^{n+\mu}} (x^2 - 1)^n - \sin^{\mu+1} \theta \frac{d^{n+\mu+1}}{dx^{n+\mu+1}} (x^2 - 1)^n. \quad (7)$$

Отсюда непосредственно следует:

$$\left(\frac{d}{d\theta} - \mu \operatorname{ctg} \theta \right) P_n^\mu = -P_n^{\mu+1}. \quad (8)$$

Подстановка (8) в (6) даёт:

$$([r \operatorname{grad}], \gamma) P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} = \tau_\mu P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} - \tau P_n^{\mu+1} e^{-\gamma_{12}(\mu+1)\varphi} \gamma_{12}. \quad (9)$$

При этом в последнем члене справа использовано тождество

$$\gamma_2 e^{\gamma_{12}(\mu+1)\varphi} = \tau e^{-\gamma_{12}(\mu+1)\varphi} \gamma_{12}.$$

Если в (9) положить $\mu = m - \frac{1}{2}$, то получается точно первое из двух равенств (28а, б), которые нам были нужны на стр. 235 (нижний индекс сферических функций пока положителен). Второе равенство получается, если положить $\mu = -\left(m + \frac{1}{2}\right)$ и использовать преобразование из (I.3.16ж):

$$P_n^{-\mu} = (-1)^\mu \frac{(n-\mu)!}{(n+\mu)!} P_n^\mu, \quad (10)$$

благодаря чему к последнему члену в (9) добавится множитель

$$-\left(n + m + \frac{1}{2}\right) \left(n - m + \frac{1}{2}\right). \quad (10а)$$

Вследствие этого такой же множитель перейдёт также в равенство (28б) на стр. 235.

Соотношение (8) выведено здесь в предположении положительных значений n . Очевидно, однако, что оно справедливо также и для отрицательных значений n . В этом случае необходимо лишь вместо индекса n написать $|n| - 1$ и принять во внимание, что область изменения μ теперь даётся соотношениями

$$|n| - 1 + \mu = -n - 1 + \mu \geq 0.$$

Далее, в случае $n < 0$ необходимо при применении формулы (10) n заменить через $-n - 1$. Однако при этом (10а) не изменяется, так что указанные равенства (28а, б) доказаны также и для отрицательных n . Оба случая $n > 0$ и $n < 0$ можно объединить в единой формуле, записав

$$P_n^{-\mu} = (-1)^\mu \frac{(n' - \mu)!}{(n' + \mu)!} P_n^\mu, \quad (10б)$$

$$n' = \begin{cases} n, & \text{когда } n \text{ положительно,} \\ -n - 1, & \text{когда } n \text{ отрицательно.} \end{cases} \quad (10в)$$

Б. Радиальное дифференциальное уравнение для проблемы Кеплера. В уравнении Дирака (1) на стр. 229 имеется оператор ($\gamma \text{ grad}$). При его вычислении мы воспользовались тем фактом, что γ обладает векторным характером (как следствие доказанных в гл. IV, § 6 четырёхвекторных свойств величин $\gamma_1, \dots, \gamma_4$). Обозначим компоненты γ в некоторой точке r, ϑ, φ по направлениям $dr, d\vartheta, d\varphi$ через $\gamma_r, \gamma_\vartheta, \gamma_\varphi$ и примем во внимание, что

$$\text{grad} = \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Тогда получим:

$$(\gamma \text{ grad}) = \gamma_r \frac{\partial}{\partial r} + \gamma_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \gamma_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (11)$$

Учитывая, далее, что γ_r направлено по r , γ_ϑ лежит в меридиональной плоскости перпендикулярно к r , γ_φ лежит в плоскости, параллельной экваториальной плоскости, перпендикулярно к r , сразу найдём:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_r &= \gamma_1 \sin \vartheta \cos \varphi + \gamma_2 \sin \vartheta \sin \varphi + \gamma_3 \cos \vartheta = \gamma_1 \sin \vartheta e^{i\varphi} + \gamma_3 \cos \vartheta, \\ \gamma_\vartheta &= \gamma_1 \cos \vartheta \cos \varphi + \gamma_2 \cos \vartheta \sin \varphi - \gamma_3 \sin \vartheta = \gamma_1 \cos \vartheta e^{i\varphi} - \gamma_3 \sin \vartheta, \\ \gamma_\varphi &= -\gamma_1 \sin \varphi + \gamma_2 \cos \varphi = \gamma_2 e^{i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

После короткого вычисления по этим формулам легко убедиться, что $\gamma_r, \gamma_\vartheta, \gamma_\varphi$ удовлетворяют тем же соотношениям, что и первоначальные величины $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$:

$$\gamma_r^2 = \gamma_\vartheta^2 = \gamma_\varphi^2 = 1, \quad \gamma_{r\vartheta} = -\gamma_{\vartheta r}, \quad \gamma_{\vartheta\varphi} = -\gamma_{\varphi\vartheta} \text{ и т. д.}$$

Подстановка (12) в (11) даёт:

$$\begin{aligned} (\gamma \text{ grad}) &= \gamma_1 e^{i\varphi} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma_{12}}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \\ &+ \gamma_3 \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right). \quad (13) \end{aligned}$$

Последнее выражение для наших целей может быть упрощено. В собственную функцию ψ , к которой надо будет применить (13), переменная φ , согласно (IV.7.27), входит только в форме (3), так что можно написать:

$$\gamma_{12} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \gamma_{12}^\mu = -\mu. \quad (14)$$

С другой стороны, переменная ϑ входит в собственную функцию только через $P_n^{m-\frac{1}{2}}$ или $P_n^{m+\frac{1}{2}}$. Но из (8) для первого из этих случаев с $\mu = m - \frac{1}{2}$ найдём:

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} P_n^\mu = \mu \text{ctg } \vartheta P_n^\mu - P_n^{\mu+1}.$$

Отсюда, учитывая (4), справа в (13) получим:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\cos \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma_{12}}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) P_n^\mu &= -\mu \frac{\sin \vartheta}{r} P_n^\mu - \frac{\cos \vartheta}{r} P_n^{\mu+1}, \\ -\frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} P_n^\mu &= -\mu \frac{\cos \vartheta}{r} P_n^\mu + \frac{\sin \vartheta}{r} P_n^{\mu+1}, \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

так что в целом будем иметь:

$$(\gamma \operatorname{grad}) P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} = \gamma_1 M e^{\gamma_{12}(\mu+1)\varphi} + \gamma_3 N e^{\gamma_{12}\mu\varphi}, \quad (16)$$

где обозначено

$$\left. \begin{aligned} M &= \sin \vartheta P_n^\mu \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mu}{r} \right) - \frac{\cos \vartheta}{r} P_n^{\mu+1}, \\ N &= \cos \vartheta P_n^\mu \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mu}{r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{r} P_n^{\mu+1}. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Далее, при произвольном α имеют место соотношения

$$\gamma_1 e^{\gamma_{12}\alpha} = e^{-\gamma_{12}\alpha} \gamma_1, \quad \gamma_3 e^{\gamma_{12}\alpha} = e^{+\gamma_{12}\alpha} \gamma_3.$$

Поэтому вместо (16) можно также написать:

$$(\gamma \operatorname{grad}) P_n^\mu e^{\gamma_{12}\mu\varphi} = e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} \gamma_1 M + e^{\gamma_{12}\mu\varphi} \gamma_3 N. \quad (18)$$

Здесь μ' означает второе из выписанных в (3) значений:

$$\mu' = -\left(m + \frac{1}{2}\right) = -(\mu + 1). \quad (18a)$$

Путём замены μ через μ' и наоборот из (18) найдём:

$$(\gamma \operatorname{grad}) P_n^{\mu'} e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} = e^{\gamma_{12}\mu\varphi} \gamma_1 M' + e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} \gamma_3 N', \quad (19)$$

где M' и N' определяются теми же соотношениями (17), что M и N , но с заменой в них μ через μ' .

Теперь для выражения χ_\pm в (IV.7.27) при помощи (18) и (19) найдём:

$$\begin{aligned} (\gamma \operatorname{grad}) \chi_\pm &= (e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} \gamma_1 M + e^{\gamma_{12}\mu\varphi} \gamma_3 N) a_\pm + \\ &+ (-1)^{\mu+1} \frac{(n' + \mu + 1)!}{(n' - \mu - 1)!} (e^{\gamma_{12}\mu\varphi} \gamma_1 M' + e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} \gamma_3 N') b_\pm. \end{aligned} \quad (20)$$

По поводу отношения факториалов во второй строчке этого равенства следует заметить: в (IV.7.27) верхний индекс второй сферической функции был равен $m + \frac{1}{2} = -\mu'$, в то время как этот индекс в (19) был равен $+\mu' = -\left(m + \frac{1}{2}\right)$. Поэтому мы должны, прежде чем применять равенство (19), пересчитать $P_n^{-\mu'}$ в $P_n^{\mu'}$, что на основании (106) будет сделано, если заменить в нём μ на $\mu' = -\mu - 1$.

Наконец, посредством равенства (IV.7.19) можно перейти от χ_\pm к ψ , при этом надо помнить, что $n = \mp k$ и равенство (25) на стр. 234, а также то обстоятельство, что в выражениях для M , N и M' , N' надо также делать различие между случаями $n = -k$ и $n = +k$. Тогда найдём:

$$(\gamma \operatorname{grad}) \psi = (1 - \gamma_4) (\gamma \operatorname{grad}) \chi_+ + (1 + \gamma_4) (\gamma \operatorname{grad}) \chi_- = e^{\gamma_{12}\mu\varphi} S + e^{\gamma_{12}\mu'\varphi} S', \quad (21)$$

где обозначено:

$$\left. \begin{aligned} S &= (1 - \gamma_4) \left\{ \gamma_1 (-1)^{\mu+1} \frac{[(-k)' + \mu + 1]!}{[(-k)' - \mu - 1]!} M' b_+ + \gamma_3 N a_+ \right\} + \\ &+ (1 + \gamma_4) \left\{ \gamma_1 (-1)^{\mu+1} \frac{(k' + \mu + 1)!}{(k' - \mu - 1)!} M' b_- + \gamma_3 N a_- \right\}, \\ S' &= (1 - \gamma_4) \left\{ \gamma_1 M a_+ + \gamma_3 (-1)^{\mu+1} \frac{[(-k)' + \mu + 1]!}{[(-k)' - \mu - 1]!} N' b_+ \right\} + \\ &+ (1 + \gamma_4) \left\{ \gamma_1 M a_- + \gamma_3 (-1)^{\mu+1} \frac{(k' + \mu + 1)!}{(k' - \mu - 1)!} N' b_- \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Величина k' , появившаяся на месте n' , очевидно, понимается в смысле равенства (10в), так же как и $(-k)'$. Тем самым в (21) вычислен первый член неквадрированного уравнения Дирака. Второй член на основании равенств (1), (19) и (27) гл. IV, § 7 равен

$$(\gamma_4 k_4 + k_0)\psi = (1 + \gamma_4)(k_4 + k_0)\chi_+ + (1 - \gamma_4)(-k_4 + k_0)\chi_- = e^{i\mu\varphi} T + e^{i\mu'\varphi} T', \quad (23)$$

$$\left. \begin{aligned} T &= (1 + \gamma_4)(k_4 + k_0)P_{-k}^{\mu} a_+ + (1 - \gamma_4)(-k_4 + k_0)P_k^{\mu} a_- \\ T' &= (1 + \gamma_4)(k_4 + k_0)P_{-k}^{-\mu'} b_+ + (1 - \gamma_4)(-k_4 + k_0)P_k^{-\mu'} b_- \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Так как зависимость от φ в сумме (21) и (23) должна исчезнуть, то имеем:

$$S + T = 0, \quad S' + T' = 0. \quad (25)$$

При умножении на $1 - \gamma_4$ или $1 + \gamma_4$ оба равенства распадаются каждое на два равенства, не содержащие γ_4 , которые могут быть записаны единым образом (вводя опять $n = \mp k$ и соответственно этому $-n = \pm k$) в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_1 (-1)^{\mu+1} \frac{(n' + \mu + 1)!}{(n' - \mu - 1)!} M' b_{\pm} + \gamma_3 N a_{\pm} + (\mp k_4 + k_0) P_{-n}^{\mu} a_{\mp} &= 0, \\ \gamma_1 M a_{\pm} + \gamma_3 (-1)^{\mu+1} \frac{(n' + \mu + 1)!}{(n' - \mu - 1)!} N' b_{\pm} + (\mp k_4 + k_0) P_{-n}^{-\mu'} b_{\mp} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Теперь из этих двух двойных уравнений должна выпасть также и зависимость от ϑ . Это может быть показано использованием соотношений между сферическими функциями. Проще исключить зависимость от ϑ , положив $\vartheta = 0$. Это мы имеем право сделать, так как зависимость от ϑ уже определена. При этом можно предположить ¹⁾, что $m > 0$ и, следовательно, $\mu > 0$, $\mu' < 0$. Тогда на основании равенств (1.3.16д, е), где n надо заменить через n' , чтобы эти равенства были справедливы также и для отрицательных n , для предела $\vartheta \rightarrow 0$ получим:

$$P_n^{\mu} = \frac{1}{2^{\mu}\mu!} \frac{(n' + \mu)!}{(n' - \mu)!} \vartheta^{\mu}, \quad (27)$$

а также принимая во внимание равенство $|\mu' + 1| = \mu$ и равенство (10б),

$$P_n^{\mu'+1} = \frac{(-1)^{\mu}}{2^{\mu}\mu!} \vartheta^{\mu}. \quad (28)$$

Из (27) при замене n на $-n$ и n' на $(n-1)'$ [ср. (10в)] ещё следует:

$$P_{-n}^{\mu} = \frac{1}{2^{\mu}\mu!} \frac{[(n-1)' + \mu]!}{[(n-1)' - \mu]!} \vartheta^{\mu}. \quad (29)$$

Теперь на основании (17), (27) и (28) с точностью до высших степеней ϑ вычислим:

$$N = \frac{1}{2^{\mu}\mu!} \frac{(n' + \mu)!}{(n' - \mu)!} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mu}{r} \right) \vartheta^{\mu}, \quad M' = \frac{(-1)^{\mu+1}}{2^{\mu}\mu!} \frac{\vartheta^{\mu}}{r}. \quad (30)$$

¹⁾ Величина m определена уравнением (146) на стр. 231, в которое входит только m^2 . Следовательно, принципиально знак у m произволен.

Подставим (29) и (30) в первое равенство (26) и примем во внимание (IV.7.29). После сокращения на общие множители (Φ^μ , γ_1 и т. д.) получится:

$$\frac{(n' + \mu + 1)!}{(n' - \mu - 1)!} \frac{b_\pm}{r} + (n - \mu) \frac{(n' + \mu)!}{(n' - \mu)!} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mu}{r} \right) b_\pm + \\ + (n + \mu) \gamma_3 (\mp k_4 + k_0) \frac{[(n-1)' + \mu]!}{[(n-1)' - \mu]!} b_\mp = 0. \quad (31)$$

Последнее соотношение следует расписать отдельно для положительных и отрицательных значений n , учтя при этом, что

$$n > 0, \quad n' = n, \quad (n-1)' = n-1, \\ n < 0, \quad n' = -n-1, \quad (n-1)' = -n.$$

В обоих случаях факториалы в числителе и знаменателе сократятся и после простого приведения получится соотношение

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{n+1}{r} \right) b_\pm + \gamma_3 (\mp k_4 + k_0) b_\mp = 0. \quad (32)$$

Тот же самый результат получится из второго равенства (26) после несколько более громоздкого вычисления. Уравнение (32) есть радиальное уравнение проблемы Кеплера; оно согласуется с уравнением (30) на стр. 236.

16. ИНТЕГРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ГИПЕРГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

К гл. IV, § 10 и гл. VII, § 8

А. Интегральное представление общих и вырожденных гипергеометрических функций. Уже Эйлеру было известно, что ряд (II.2.17) допускает следующее представление через интеграл:

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 u^{\alpha-1} (1-u)^{\gamma-\alpha-1} (1-ux)^{-\beta} du. \quad (1)$$

Именно, если разложить последний множитель под знаком интеграла в биномиальный ряд и проинтегрировать полученное выражение по формуле Эйлера

$$B(p, q) = \int_0^1 u^{p-1} (1-u)^{q-1} du = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}, \quad (2)$$

то из (9) получим указанный ряд для F . Очевидно, что представление (1) при указанном в нём вещественном пути интегрирования ограничено условиями

$$\operatorname{Re} \alpha > 0, \quad \operatorname{Re}(\gamma - \alpha) > 0, \quad (3)$$

а (2) ограничено условиями

$$\operatorname{Re} p > 0, \quad \operatorname{Re} q > 0. \quad (3a)$$

Как правило, более полезным является вместо вещественного пути интегрирования замкнутый путь интегрирования в комплексной плоскости. Поэтому полагаем:

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = C \oint u^{\alpha-1} (1-u)^{\gamma-\alpha-1} (1-ux)^{-\beta} du. \quad (4)$$

Если здесь производить интегрирование по замкнутому пути в плоскости u , который обходит точки 0 и 1 и исключает третью сингулярную точку $u = \frac{1}{x}$ (рис. 60а), то ограничения (3) снимаются. Однако в этом случае сумма показателей степеней u и $1-u$, т. е. γ , должна быть целым числом. В противном случае обход вокруг точек 0, 1 для подинтегрального выражения не был бы замкнутым путём. Выбирая, далее, также и в представлении (3) для $B(p, q)$ тот же путь интегрирования в предположении, что $p+q =$ целому числу, и проводя в (4) то же преобразование, что и ранее в (1) [разложение в биномиальный ряд $(1-ux)^{-\beta}$ и т. д.], снова получим определение в виде ряда для F . Значение постоянной при этом будет равно [см. несколько более общее рассмотрение при равенствах (5) и (6)]:

$$C = \frac{1}{1 - e^{-2\pi i \alpha}} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma - \alpha)}. \quad (4a)$$

Как следует поступить в случае нецелого значения для γ ? В этом случае на помощь приходит метод¹⁾ «интеграла по двойному контуру». Путь интегрирования обходит каждую из обеих точек $u=0$ и $u=1$ дважды, один раз в положительном направлении, другой раз в отрицательном направлении. При этом множители, которые появляются при обоих обходах, взаимно исключаются, и, следовательно, подинтегральное выражение возвращается к своему исходному значению (см. рис. 60б). Говоря языком теории функций, изменение значений подинтегрального выражения должно быть представлено не на плоскости u , а на римановой поверхности, которая разветвляется в точках $u=0$ и 1. При каждом обходе вокруг 0 и 1 мы переходим на другой лист римановой поверхности; однако после двойного обхода точек ветвления мы возвращаемся на исходный лист, так что конечная точка пути интегрирования совпадает с начальной точкой A .

Проследим это, в частности, на примере интеграла для $B(p, q)$. В начальной точке A , которая пусть лежит на вещественной оси между 0 и 1, выберем фазу φ переменной u (при обычном представлении $u = |u|e^{i\varphi}$) равной нулю, так же как и фазу $1-u$. Тогда при отдельных обходах по указанному пути интегрирования к подинтегральному выражению добавляются множители в следующем порядке:

$$e^{2\pi i q}, \quad e^{2\pi i p}, \quad e^{-2\pi i q}, \quad e^{-2\pi i p}.$$

Если выполнены условия $\operatorname{Re} p > 0$, $\operatorname{Re} q > 0$, то путь интегрирования может быть стянут к отрезку $0 \rightarrow 1$, пробегаемому четыре раза (два раза

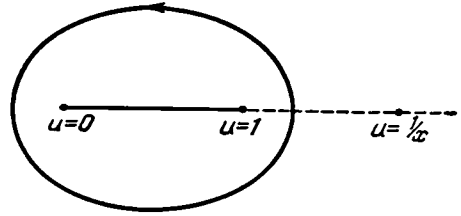


Рис. 60а. Вещественные значения $x < 1$. При произвольном значении x путь интегрирования должен быть проведён так, чтобы точка $u = \frac{1}{x}$ оставалась вне контура.

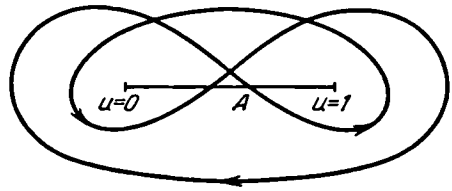


Рис. 60б. Интеграл по двойному контуру, γ — нецелое.

¹⁾ Наброски «интегралов по двойным контурам» найдены в оставшихся бумагах Римана; см. Werke, Nachträge, Leipzig, 1902, стр. 74.

в положительном и два раза в отрицательном направлении). При этом множители, появляющиеся в результате обхода полюсов, будут равны

$$1, \quad -e^{2\pi i q}, \quad +e^{2\pi i(p+q)}, \quad -e^{2\pi i p}.$$

Поэтому имеем:

$$\oint = (1 - e^{2\pi i p})(1 - e^{2\pi i q}) \int_0^1.$$

Таким образом из (2) для $B(p, q)$ получается следующее представление, справедливое при произвольных p, q :

$$B(p, q) = \frac{1}{(1 - e^{2\pi i p})(1 - e^{2\pi i q})} \oint u^{p-1}(1-u)^{q-1} du = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}. \quad (5)$$

Вследствие этого и представление (4) справедливо для произвольных значений α, β, γ , если там в качестве пути интегрирования взять двойной обход вокруг точек 0 и 1. Используя (5) и произведя сравнение с определением F при помощи ряда, для множителя C в (4) получим:

$$C = \frac{1}{(1 - e^{2\pi i \alpha})(1 - e^{2\pi i(\gamma - \alpha)})} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma - \alpha)}. \quad (6)$$

Произведя предельный переход к вырожденной (конфлюэнтной) функции $\beta \rightarrow \infty, x \rightarrow 0, \beta x \rightarrow p$, видим, что последний множитель в (4) переходит в экспоненциальную функцию e^{pu} , и из (4) получается:

$$F(\alpha, \gamma; p) = C \oint u^{\alpha-1}(1-u)^{\gamma-\alpha-1} e^{pu} du. \quad (7)$$

Постоянная C определяется или через (4а) или через (6) в зависимости от того, производится ли в (7) интегрирование по петле или двойному контуру.

Аналогичным представлением мы уже воспользовались в гл. II, равенство (7.15), для полиномов Лагерра (частный случай $\gamma = 1$). Для того чтобы привести настоящие обозначения в согласование с употреблёнными там, введём новую переменную интегрирования $y = -\rho u$. Тогда из (7) получим:

$$F(\alpha, 1; p) = C' \oint y^{\alpha-1}(y+\rho)^{-\alpha} e^{-y} dy, \quad C' = C e^{-i\pi\alpha}. \quad (7a)$$

Так как в качестве пути интегрирования в этом случае может быть взята простая петля, то для C' из (4а) получается:

$$C' = \frac{1}{2i \sin \alpha\pi} \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(1-\alpha)} = \frac{1}{2\pi i}, \quad (7b)$$

где использовано известное соотношение (4) из дополнения (7) для Γ -функций.

Найденный в (7b) коэффициент C' точно согласуется с коэффициентом простого интеграла по замкнутому пути в (II.7.15). Тем самым установлена связь между общим представлением (7) и прежним представлением для $\gamma = 1$ (или $\gamma =$ целому числу).

Б. Асимптотическое поведение вырожденных гипергеометрических функций. Вернёмся к общему случаю (α и γ произвольны, путь интегрирования по восьмёрке) и исследуем асимптотически представление для $F(\alpha, \gamma; p)$ при $p \rightarrow \infty$. Для этого двойной обход разобьём на два контура, которые замыкаются вокруг обеих точек ветвления и уходят в бесконечность. В полной аналогии с рассуждениями в гл. II, § 7,

равенство (19), полагаем:

$$F = \frac{1}{2}(G_1 + G_2). \quad (8)$$

Переходя к переменной y [равенство (7a)], считаем, что G_1 принадлежит к точке ветвления $y=0$, а G_2 — к точке ветвления $y=-\rho$ (рис. 61). Здесь ρ , так же как и в случае непрерывного спектра проблемы Кеплера, мнимая величина. Тогда из (7) получим:

$$\frac{1}{2}G_1 = C(-\rho)^{-\alpha} \oint y^{\alpha-1} \left(\frac{y+\rho}{\rho}\right)^{\gamma-\alpha-1} e^{-y} dy. \quad (9)$$

Обе части подразумеваемого здесь двойного контура, из которых одна нарисована на рис. 61 пунктирной линией, пробегаются в противоположных направлениях на двух различных листах римановой поверхности, принадлежащей к переменной y ; при переходе с «первого» листа на «второй» лист к подинтегральному выражению добавляется множитель $e^{2\pi i(\gamma-\alpha)}$, так как между двумя петлями вокруг точки $y=0$, согласно с предшествующим рис. 60б, необходимо обойти один раз точку ветвления $y=-\rho$. Отсюда следует, что если мы через \oint будем в дальнейшем обозначать простую, проходимую в положительном направлении петлю на первом листе, то в (9) C надо заменить через

$$C' = (e^{2\pi i(\gamma-\alpha)} - 1)C$$

и при этом под C понимать значение (6).

Поступая теперь точно так же, как и в гл. II, § 7 при выводе равенства (27) и следующих, т. е. разлагая $(y+\rho)^{\gamma-\alpha-1}$ при больших ρ в «асимптотически сходящийся» ряд, и используя соотношения между Γ -функциями, получим:

$$\frac{1}{2}G_1 = A_1(-\rho)^{-\alpha} \left(1 + \frac{\alpha(\gamma-\alpha-1)}{11\rho} + \dots\right), \quad A_1 = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}, \quad (10)$$

что является обобщением равенства (II.7.25), которое получается из (10) при $\gamma=1$ и $\alpha=-n$.

Точно так же для другого контура рис. 61 получается обобщение равенства (II.7.26):

$$\frac{1}{2}G_2 = A_2 e^{\rho} \rho^{\alpha-\gamma} \left(1 - \frac{(\alpha-1)(\gamma-\alpha)}{11\rho} + \dots\right), \quad A_2 = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}. \quad (11)$$

Равенство (11) получается из (10) путём замены α , $\gamma-\alpha$, ρ через $\gamma-\alpha$, α , $-\rho$ и прибавлением множителя e^{ρ} . На основании представления (7) это вполне понятно: если здесь переменную интегрирования u заменить через $1-u$, то меняются роли сингулярных точек 0 и 1 при одновременной замене α на $\gamma-\alpha$ и ρ на $-\rho$; множитель e^{ρ} получается из $e^{\rho u} = e^{\rho} e^{-\rho u}$. Перемена же местами точек 0 и 1 означает переход от G_1 к G_2 .

Теперь на основании (8) асимптотическое выражение для F получается в виде суммы (10) и (11).

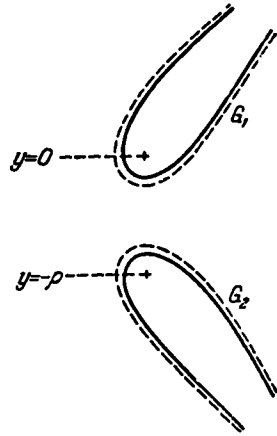


Рис. 61. Две асимптотические части величины F .

В качестве примера рассмотрим функции F, F_1 [равенство (46) на стр. 260], которые принадлежат к непрерывному спектру водорода. Ввиду того что величина ρ здесь чисто мнимая, порядок величины обеих частей G_1, G_2 определяется вещественными частями соответствующих показателей степеней у ρ . Используя указанную на стр. 261 связь между n_r и главным квантовым числом n , вместо равенств (46) на стр. 260 можно написать:

$$F = F(\sqrt{-} + i|n|, 2\sqrt{-} + 1; \rho), \quad (12)$$

$$F_1 = F(\sqrt{-} + i|n| + 1, 2\sqrt{-} + 1; \rho), \quad (13)$$

где $\sqrt{-} = \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}$, n — мнимое главное квантовое число. Учитывая это, из (10) и (11) заключаем, что

$$\text{у } F \quad G_1 \gg G_2, \text{ следовательно, } F \rightarrow \frac{1}{2} G_1 = A_1 (-\rho)^{-\sqrt{-} - i|n|},$$

$$\text{у } F_1 \quad G_2 \gg G_1, \text{ следовательно, } F_1 \rightarrow \frac{1}{2} G_2 = A_2 e^{\rho} \rho^{-\sqrt{-} + i|n|}.$$

Отсюда из (4а) на стр. 260 следует:

$$\left. \begin{aligned} R_1 &= \frac{1}{\rho} \left[A_2 e^{\frac{\rho}{2}} \rho^{i|n|} - A A_1 (-1)^{-\sqrt{-}} e^{-\frac{\rho}{2}} (-\rho)^{-i|n|} \right], \\ R_2 &= \frac{e}{\rho} \left[A_2 e^{\frac{\rho}{2}} \rho^{i|n|} + A A_1 (-1)^{-\sqrt{-}} e^{-\frac{\rho}{2}} (-\rho)^{-i|n|} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Эти выражения, как это и должно быть на основании изложенного на стр. 261, в своей существенной части (т. е. с точностью до постоянного фазового множителя) вещественны. Прежде всего, ввиду того, что ρ чисто мнимая величина

$$e^{\frac{\rho}{2}} \rho^{i|n|} \quad \text{и} \quad e^{-\frac{\rho}{2}} (-\rho)^{-i|n|}$$

являются сопряженными. Объединяя их, можно написать:

$$e^{\pm \frac{\rho}{2}} (\pm \rho)^{\pm i|n|} = e^{-\frac{\pi}{2}|n|} e^{\pm i \left(\frac{|\rho|}{2} + (n) \ln |\rho| \right)}.$$

Далее, как это легко видеть из (10) и (11), принимая во внимание значения α, γ из (12) и (13), в нашем случае A_1 и A_2 являются сопряженными. Поэтому можно написать:

$$A_{1,2} = |A_1| e^{\pm i\alpha}.$$

Наконец, A в непрерывном спектре по абсолютной величине равно единице. То же самое справедливо относительно

$$(-1)^{-\sqrt{-}} = e^{+i\pi\sqrt{-}}.$$

На основании равенства 5а на стр. 261 полагаем:

$$A(-1)^{-\sqrt{-}} = -e^{2i\alpha + i\pi\sqrt{-}}.$$

Поэтому из (14) следует:

$$\left. \begin{aligned} R_1 &= \frac{2B}{|\rho|} \cos \left(\frac{|\rho|}{2} + |n| \ln |\rho| - \delta \right), \\ R_2 &= -\frac{2B|e|}{|\rho|} \sin \left(\frac{|\rho|}{2} + |n| \ln |\rho| - \delta \right). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

где введены обозначения:

$$\left. \begin{aligned} B &= |B| e^{i\beta}, \quad |B| = |A_1| e^{-\frac{\pi}{2}|n|} = \frac{\Gamma(2\sqrt{-1})}{\Gamma(\sqrt{-1} + 1 + l|n|)} e^{-\frac{\pi}{2}|n|}, \\ e^{i\beta} &= e^{i\alpha + \frac{i\pi}{2}(\sqrt{-1}-1)}, \quad \delta = \alpha_1 + a + \frac{\pi}{2}\sqrt{-1}, \quad |\varepsilon| = \sqrt{\frac{E-E_n}{E+E_0}} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Следовательно, асимптотическое поведение релятивистских радиальных собственных функций в существенных чертах совпадает с асимптотическим поведением собственных функций уравнения Шредингера (II.7.34). Это обстоятельство использовано нами в гл. IV, § 10 при нормировании релятивистских собственных функций. Фазовый множитель $e^{i\beta}$ точно согласуется с найденным в (IV.10.56) фазовым множителем.

В асимптотическое поведение общей гипергеометрической функции. Теперь исследуем, хотя бы в сжатой форме, асимптотическое поведение общей гипергеометрической функции. Это поведение было нами использовано при обсуждении парадокса Клейна на стр. 280. Будем исходить из дифференциального уравнения этих функций в гл. II, уравнение (2.18). Пренебрегая всеми более низкими степенями x , это уравнение мы можем для предельного случая $x \rightarrow \infty$ записать в виде:

$$x^2 \frac{d^2 F}{dx^2} + (\alpha + \beta + 1)x \frac{dF}{dx} + \alpha\beta F = 0. \quad (17)$$

Для проведения интегрирования сделаем подстановку

$$F = Cx^\lambda. \quad (18)$$

Внося это в (17), получим для λ следующее уравнение:

$$\lambda(\lambda - 1) + (\alpha + \beta + 1)\lambda + \alpha\beta = 0,$$

т. е.

$$\lambda^2 + (\alpha + \beta)\lambda + \alpha\beta = (\lambda + \alpha)(\lambda + \beta) = 0, \quad \lambda = \begin{cases} -\alpha, \\ -\beta. \end{cases}$$

Следовательно, общее решение (17), если там x для удобства заменить через $-x$, гласит:

$$F = C_1(-x)^{-\alpha} + C_2(-x)^{-\beta}. \quad (19)$$

Величины C_1, C_2 с точки зрения приближенного уравнения (17) являются неопределенными постоянными интегрирования. Для того чтобы их определить, надо использовать общее определение F , например (4).

Предположим¹⁾, что $\alpha > \beta$, или, точнее,

$$\operatorname{Re} \alpha > \operatorname{Re} \beta, \quad \text{следовательно, } \operatorname{Re}(\alpha - \beta) > 0. \quad (20)$$

Отсюда следует:

$$|x^{-\alpha}| \ll |x^{-\beta}| \quad \text{для } x \rightarrow \infty,$$

так что (19) упрощается и принимает вид:

$$F \rightarrow C_2(-x)^{-\beta} \quad \text{для } x \rightarrow \infty. \quad (21)$$

¹⁾ Ввиду того, что F симметрично относительно α и β , это предположение не является ограничением общности. Оно нужно лишь для того, чтобы сделать выбор между α и β при предельном переходе.

Одновременно в равенстве (4) мы произведём упрощение, заменив

$$(1 - ux)^{-\beta} \text{ через } (-x)^{-\beta} u^{-\beta}, \quad (21a)$$

так что в результате получим:

$$F \rightarrow C (-x)^{-\beta} \oint u^{\alpha-\beta-1} (1-u)^{\gamma-\alpha-1} du. \quad (22)$$

При этом существенно сделать следующее замечание относительно пути интегрирования: этот путь в (4) должен обходить вокруг точек $u = 0$ и $u = 1$ (однократно или двукратно в зависимости от того, будет ли γ целым или нецелым), но точка сингулярности $u = \frac{1}{x}$ должна остаться вне замыкаемой области. При $x \rightarrow \infty$ эта последняя точка приближается к $u = 0$, так что путь интегрирования закрепляется между точками $u = 0$ и $u = \frac{1}{x}$. Надо ещё заметить, что сходимость рассматриваемого интеграла благодаря этому не нарушается, так как функция $|u^{\alpha-\beta-1}|$ ввиду (20) в точке $u = 0$ интегрируема.

По внешнему виду интеграл (22) кажется тождественным с интегралом (5) для $B(p, q)$, если только в последнем положить $p = \alpha - \beta$, $q = \gamma - \alpha$. Однако между ними есть различие, проистекающее оттого, что путь в рассматриваемом сейчас интеграле закреплён между точками $u = 0$ и $u = \frac{1}{x}$. В (22) путь интегрирования огибает точку $u = 0$, которой первоначально [см. (4)] принадлежал показатель степени $\alpha - 1$ [показатель $\alpha - \beta - 1$ в (22) появился лишь в результате перехода к приближённому соотношению (21a)]. С другой стороны, множитель

$$1 - e^{2\pi i p}$$

в (5) произошёл оттого, что точка $u = 0$ огибалась с показателем степени $p - 1$ таким образом, что путь интегрирования после обхода лежал на другой листе соответствующей римановой поверхности, чем до обхода. Этот другой лист римановой поверхности после обхода в рассматриваемом случае определяется показателем степени α , а не $p = \alpha - \beta$. Следовательно, в (5) мы должны заменить

$$1 - e^{2\pi i p} \text{ через } 1 - e^{2\pi i \alpha}, \text{ а не через } 1 - e^{2\pi i (\alpha - \beta)}.$$

Поэтому для указанного в (22) интеграла из (5) получим:

$$(1 - e^{2\pi i \alpha})(1 - e^{2\pi i (\gamma - \alpha)}) B(\alpha - \beta, \gamma - \alpha). \quad (23)$$

Сравнение (21), (22) и (23) даёт:

$$C_2 = C(1 - e^{2\pi i \alpha})(1 - e^{2\pi i (\gamma - \alpha)}) B(\alpha - \beta, \gamma - \alpha).$$

Внося сюда для C значение (6) и одновременно для функции B её представление через Γ -функции, найдём:

$$C_2 = \frac{\Gamma(\alpha - \beta) \Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma - \beta)}. \quad (24)$$

Так как гипергеометрическая функция симметрична относительно α и β , то из (19) следует, что C_1 и C_2 получаются друг из друга переменными местами α и β . Поэтому

$$C_1 = \frac{\Gamma(\beta - \alpha) \Gamma(\gamma)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma - \alpha)}. \quad (24a)$$

На основании сказанного на стр. 27 относительно бесселевых функций можно дополнить полученное приближённое асимптотическое выражение ещё дальнейшим приближением, считая C_1 и C_2 не постоянными, а «медленно меняющимися функциями». Для этих функций гипергеометрическое дифференциальное уравнение даёт уравнение второго порядка [аналогично уравнению (21) на стр. 27], которое интегрируется следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= \bar{C}_1 \left(1 - \frac{a}{x} + \dots \right), & a &= \alpha \frac{\alpha - \beta + 1}{\beta - \alpha - 1}, \\ C_2 &= \bar{C}_2 \left(1 - \frac{b}{x} + \dots \right), & b &= \beta \frac{\beta - \gamma + 1}{\alpha - \beta - 1}. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Новые константы интегрирования \bar{C}_1 , \bar{C}_2 даются опять равенствами (24а) и (24). Равенства (25) вместе с (19) дают первые члены известного представления гипергеометрических функций. Однако для наших целей достаточно уже асимптотического представления в первом приближении.

В заключение коснёмся ещё одной проблемы: расщепления функции F на две, определённые на всей плоскости x функции:

$$F = \frac{1}{2} (F^{(1)} + F^{(2)}), \quad (26)$$

из которых одна асимптотически себя ведёт как $C_1(-x)^{-\alpha}$, а другая — как $C_2(-x)^{-\beta}$. Это расщепление содержится в интегральном представлении (5).

Подинтегральное выражение на плоскости u имеет четыре точки сингулярности 0, 1, $1/x$, ∞ . В то время как F представляется путём интегрирования вокруг точек 0, 1, функции $\frac{1}{2}F_1$ и $\frac{1}{2}F_2$ получаются при путях интегрирования вокруг 0, $1/x$ и соответственно вокруг 1, ∞ , при этом в зависимости от характера α , β , γ надо пользоваться однократным или двукратным контурами. Соотношение (26) следует из эквивалентности путей интегрирования. В случае конфлюэнтных гипергеометрических функций ($\beta \rightarrow \infty$, $x \rightarrow 0$) обе петли составляющих функций уходят в бесконечность (0, ∞ для F_1 ; 1, ∞ для F_2). Этим замечанием восстановлена связь между проведёнными здесь рассуждениями и прежними рассуждениями [равенства (8)—(11)].

Г. Предельный переход для больших значений параметров в общей гипергеометрической функции. Матричные элементы в равенствах (VII.2.27) были представлены через функцию

$$F(-n_1, -n_2, 1; x) \left\{ \begin{aligned} n_1 &= \frac{\alpha Z}{i\beta_1}, & n_2 &= \frac{\alpha Z}{i\beta_2}, \\ x &= -\frac{4n_1 n_2}{(n_1 - n_2)^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \right. \quad (27)$$

В случае $\beta_1, \beta_2 \sim 1$ (жёсткое излучение с исключением коротковолновой границы) числа n_1, n_2 являются малыми; в этом случае приближения в гл. VII могли основываться на разложении F в степенной ряд. В случае $\beta_1, \beta_2 \ll 1$ (мягкое излучение) величины n_1, n_2 являются большими отрицательными мнимыми числами; необходимый в этом случае предельный переход может быть произведён лишь исходя из интегрального представления. Положим:

$$\left. \begin{aligned} n_2 &= -in, & n_1 &= -ipn, & n &= \frac{\alpha Z}{\beta_2}, & \rho &= \frac{n_1}{n_2} = \frac{\beta_2}{\beta_1}, \\ n &\rightarrow \infty, & 0 < \rho < 1, & x &= -\frac{4\rho}{(1-\rho)^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Тогда на основании (4а) для $\gamma = 1$ имеем:

$$C = \frac{e^{i\pi\alpha}}{2\pi i} = \frac{e^{-\pi\rho n}}{2\pi i},$$

и на основании (4)

$$F = \frac{e^{-\pi\rho n}}{2\pi i} \oint u^{i\rho n-1} (1-u)^{-i\rho n} (1-ux)^{-in} du, \quad (29)$$

$$F' = \frac{e^{-\pi\rho n}}{2\pi} n \oint u^{i\rho n} (1-u)^{-i\rho n} (1-ux)^{-in-1} du. \quad (29a)$$

Путь интегрирования огибает точки 0 и 1 в положительном направлении; точка $u = \frac{1}{x}$ остаётся с внешней стороны этого пути. Выражения (29) и (29а) могут быть единой формулой записаны в форме

$$X = \oint e^{nf(u)} \varphi(u) du, \quad (30)$$

где подинтегральное выражение разбито на быстро изменяющийся множитель $\exp(nf)$ и множитель φ , медленно изменяющийся с изменением u . Имеем:

$$f(u) = i \ln \frac{u^\rho}{(1-u)^\rho (1-ux)} \quad (31)$$

и для (29) и соответственно (29а)

$$\varphi(u) = \frac{e^{-\pi\rho n}}{2\pi} \left(-\frac{i}{u} \text{ соответственно } \frac{n}{1-ux} \right). \quad (31a)$$

В этой же форме (31) будем считать представленными также и величины, которые в (VII.2.27) появились в качестве множителей при M_ρ и соответственно M_ρ' , M_ρ'' , а именно:

$$\left. \begin{aligned} P &= (n_2 - n_1 \cos \alpha) F + (1 - \cos \alpha)(1-x) F', \\ Q &= n_1 F + (1-x) F'. \end{aligned} \right\} \quad (316)$$

В этих случаях под φ следует понимать выражения:

$$\varphi = \frac{n}{2\pi} e^{-\pi\rho n} \left[-\frac{1-\rho \cos \alpha}{u} + (1-\cos \alpha) \frac{1-x}{1-ux} \right] \quad (31b)$$

и соответственно

$$\varphi = \frac{n}{2\pi} e^{-\pi\rho n} \left(-\frac{\rho}{u} + \frac{1-x}{1-ux} \right). \quad (31r)$$

Форма интеграла (30) выбрана с учётом *метода перевала*¹⁾, который был уже упомянут на стр. 391. В этом методе мы представляем функцию f в виде разложения

$$f(u) = f(u_0) + (u-u_0) f'(u_0) + \frac{(u-u_0)^2}{2} f''(u_0) + \frac{(u-u_0)^3}{6} f'''(u_0) + \dots \quad (32)$$

¹⁾ См. Франк и Мизес, т. I, 2-е изд. стр. 44; т. II, стр. 834. Впервые этот метод был развит Риманом в одной работе в 1863 г. (Ges. Werke, 2 Aufl., стр. 424. Teubner, 1892) о гипергеометрических рядах, которая близка к рассмотренным нами вопросам. Однако всеобщее распространение метод получил после того, как его в 1909 г. вновь открыл Дебай в своих исследованиях по бесселевым функциям.

и определяем седловую точку u_0 из уравнения $f'(u) = 0$. На основании (31), принимая во внимание значение x в (28), получим:

$$\left. \begin{aligned} u_0^2 - (1 - \rho) u_0 + \frac{(1 - \rho)^2}{4 \sin^2 \frac{\alpha}{2}} &= 0, \\ u_0 &= \frac{1 - \rho}{2} (1 \pm i \operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2}). \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Здесь необходимо различать, какой из обоих перевалов подходит для решения задачи: тот, который лежит выше действительной оси, или тот, который лежит ниже. Это зависит от того, в какой из этих точек $\exp [nf(u_0)]$ имеет наибольшее абсолютное значение или, что то же самое, в какой из точек вещественная часть $f(u_0)$ больше. Положим:

$$u_0 = r_0 e^{i\varphi_0}, \quad u_0 - 1 = r_1 e^{i\varphi_1},$$

$$u_0 - \frac{1}{x} = r_2 e^{i\varphi_2},$$

тогда получим:

$$\operatorname{Re} f(u_0) = \rho(\varphi_1 - \varphi_0) + \varphi_2.$$

Последнее выражение положительно, если u_0 лежит выше действительной оси (рис. 62), и отрицательно в противоположном случае. Поэтому надо учитывать лишь точку перевала:

$$u_0 = \frac{1 - \rho}{2} \left(1 + i \operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2} \right), \quad (33a)$$

через которую и необходимо провести путь интегрирования¹⁾. Заменяя медленно меняющуюся функцию $\varphi(u)$ через $\varphi(u_0)$ и принимая во внимание (32), мы из (30) получим:

$$X = -\varphi(u_0) e^{nf(u_0)} \int_{-i}^{+i} e^{n \frac{y^2}{2} f''(u_0) + \dots} dy, \quad y = u - u_0. \quad (34)$$

Переходя, далее, к переменной $z = \sqrt{n} y$ и принимая во внимание, что $\sqrt{n} e \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, а также вводя обозначение

$$a = -f''(u_0) \quad (34a)$$

и пренебрегая членами более высокого порядка в показателе степени, найдём:

$$X = -\frac{\varphi(u_0)}{\sqrt{n}} e^{nf(u_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a}{2} z^2} dz = -\sqrt{\frac{2\pi}{na}} \varphi(u_0) e^{nf(u_0)}. \quad (34b)$$

¹⁾ По Дебаю интегрирование должно быть проведено по пути самого крутого подъёма и спуска. Однако путь может быть изменён, если он не проходит через точку сингулярности (здесь $u = \frac{1}{x}$) и проведён от области малых значений подинтегрального выражения к таким же малым значениям. Доказательство, что эти условия при вычислениях в тексте действительно выполнены, мы опускаем. Отрицательный знак (34) и (34a) получается потому, что путь интегрирования, как это указано на рис. 62, должен быть проведён вокруг точек 0, 1 в положительном направлении.

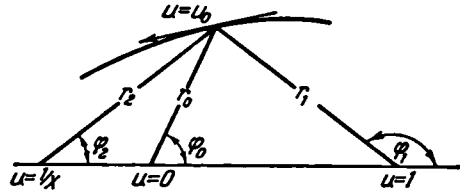


Рис. 62. Выбор между двумя перевалами, вычисленными в равенстве (33). Доказательство того, что именно перевал, расположенный выше действительной оси, должен быть принят во внимание.

Отсюда на основании (31a) имеем:

$$\left. \begin{array}{l} F \\ F' \end{array} \right\} = \frac{e^{-\pi \rho n}}{\sqrt{2\pi n a}} \left\{ \begin{array}{l} l/u_0 \\ -n/(1-u_0 x) \end{array} \right\} e^{n\varphi(u_0)}. \quad (35)$$

Для применений в гл. VII, § 8 нам нужны ещё вычисления с выражениями (31б) F и F' , и именно в том частном случае, когда обе вычисленные в (33) седловые точки лежат близко друг к другу. Это как раз тот случай, когда $\operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2} \rightarrow 0$ и, следовательно, когда величина

$$\alpha' = \pi - \alpha \quad (36)$$

очень мала. Тогда, согласно (33a), подходящий перевал при пренебрежении высшими степенями α' будет:

$$u_0 = \frac{1-\rho}{2} \left(1 + \frac{i\alpha'}{2} + \frac{i\alpha'^3}{24} \right). \quad (36a)$$

Отсюда следует [приняв также во внимание значение x из (27)]:

$$\left. \begin{array}{l} 1 - u_0 = \frac{1+\rho}{2} \left(1 - \frac{1-\rho}{1+\rho} \frac{i\alpha'}{2} - \frac{1-\rho}{1+\rho} \frac{i\alpha'^3}{24} \right), \\ 1 - u_0 x = \frac{1+\rho}{1-\rho} \left(1 + \frac{\rho}{1+\rho} i\alpha' - \frac{\rho}{1+\rho} \frac{\alpha'^2}{2} - \frac{\rho}{1+\rho} \frac{i\alpha'^3}{6} \right). \end{array} \right\} \quad (36b)$$

Ограничиваясь в $f''(u_0)$ и $f'''(u_0)$ низшими степенями α' , из (31) найдём:

$$\left. \begin{array}{l} f''(u_0) = -\frac{8\rho\alpha'}{(1-\rho)(1+\rho)^2}, \quad f'''(u_0) = \frac{32i\rho}{(1-\rho^2)^2}, \\ f(u_0) = 2\pi\rho - l(1+\rho) \ln \frac{1+\rho}{1-\rho} + \frac{\rho}{1+\rho} \frac{i\alpha'^2}{2} - \frac{\rho(1-\rho)}{(1+\rho)^2} \frac{\alpha'^3}{6}. \end{array} \right\} \quad (37)$$

Изменяя несколько (34a) и вводя обозначения

$$\frac{1}{2} f''(u_0) = -a\alpha', \quad \frac{1}{6} f'''(u_0) = ib, \quad (37a)$$

полагая, следовательно,

$$a = \frac{4\rho}{(1-\rho)(1+\rho)^2}, \quad b = \frac{16}{3} \frac{\rho}{(1-\rho^2)^2}, \quad (37b)$$

дополним интеграл (34) сохранением следующего члена в разложении (32):

$$X = -\varphi(u_0) e^{n\varphi(u_0)} \int_{-a}^{+a} e^{-na'ay^2 + ibny^3} dy. \quad (38)$$

Вводя, далее, новую переменную интегрирования $z = \sqrt[3]{n} u$ и поступая так же, как в (34б), получим из (38):

$$X = -\frac{\varphi(u_0)}{\sqrt[3]{n}} e^{n\varphi(u_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a'z^2 + ibz^3} dz, \quad (38a)$$

где обозначено¹⁾

$$a' = \sqrt[3]{n} a' a. \quad (38b)$$

1) То, что предельный переход $n \rightarrow \infty$ мы совершаем в пределах интегрирования, но не в величине α' , является математической некорректностью. Она оправдывается тем, что одновременно с $n \rightarrow \infty$ мы должны будем рассмотреть также и предельный переход $\alpha' \rightarrow 0$. Подробности будут даны в конце этого дополнения.

Интеграл (38а) может быть сведён к хорошо изученному интегралу Эйри, применяемому в теории дифракции света:

$$A(q) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(t^3 - qt)} dt. \quad (38в)$$

Этот же интеграл выражается через бесселевы функции с индексом $1/3$. Когда q равно отрицательной вещественной величине, как в (39а), имеет место равенство ($H^{(1)}$ есть «первая функция Ганкеля», см. стр. 27):

$$A(q) = -\frac{\pi}{6} \sqrt{|q|} e^{-\frac{i\pi}{3}} H_{1/3}^{(1)} \left[2i \left(\frac{|q|}{3} \right)^{3/2} \right]. \quad (38г)$$

Для того чтобы иметь возможность использовать эти соотношения в наших целях, положим в (38а)

$$z = \beta t + \gamma \quad (39)$$

и определим β , γ так, чтобы коэффициент при it^3 в экспоненте стал равным единице, а коэффициент при t^2 обратился в нуль; тогда коэффициент при t будет являться аргументом интеграла Эйри; член, не зависящий от t , будет вынесен из-под интеграла в качестве постоянной. Простое вычисление даёт:

$$\left. \begin{aligned} \beta &= b^{-1/2}, & \gamma &= -\frac{i}{3} \frac{a'}{b}, & q &= -\frac{1}{3} \frac{a'^2}{b^{3/2}}, & C &= e^s, \\ s &= \frac{2}{27} \frac{a'^3}{b^2} = 2 \left(\frac{|q|}{3} \right)^{3/2} = \frac{\pi a'^3}{6} \frac{\rho(1-\rho)}{(1+\rho)^2}. \end{aligned} \right\} \quad (39а)$$

Далее, на основании (38а, б, в) получается:

$$X = \frac{\pi}{4 \sqrt{3}} (1-\rho) a' \varphi(u_0) e^{nf(u_0)+s-\frac{i\pi}{3}} H_{1/3}^{(1)}(is). \quad (39б)$$

Подставляя сюда $f(u_0)$ из (37) и $\varphi(u_0)$ из (31г) и принимая во внимание (36г) (переход $a' \rightarrow 0$ должен быть сделан в $\varphi(u_0)$, а не в $\exp[nf(u_0)]$, которая очень чувствительна к погрешностям), для Q [равенство (31б)] получим:

$$Q = -\frac{\pi a'}{8 \sqrt{3}} (1-\rho) e^{\rho n \left(\pi + \frac{i}{2} \frac{a'^2}{1+\rho} \right)} \left(\frac{1+\rho}{1-\rho} \right)^{-i(1+\rho)n} e^{\frac{2i\pi}{3}} H_{1/3}^{(1)}(s). \quad (40)$$

Беря теперь $\varphi(u_0)$ не из (31г), а из (31в), т. е. вычисляя не Q , а P , мы наталкиваемся на затруднение, так как в том же приближении при $a' \rightarrow 0$ получим, что $\varphi(u_0) = 0$. Ясно, что это означает, что предшествующее приближение недостаточно для вычисления P и что в этом случае $\varphi(u)$ также должна быть разложена в точке $u = u_0$ и дополнена следующим членом разложения, пропорциональным $u - u_0 = y$. Тогда вместо интеграла (38в) будем иметь интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(t^3 - qt)} t dt = 2iA'(q),$$

т. е. производную от интеграла Эйри, которая аналогично (38г) может быть выражена через функцию Ганкеля:

$$H_{1/3}^{(1)} \left[2i \left(\frac{|q|}{3} \right)^{3/2} \right].$$

Таким путём для P вместо (40) получим:

$$P = \frac{ln\alpha'^2}{8\sqrt{3}}(1-\rho)e^{pn\left(\pi + \frac{i}{2}\frac{\alpha'}{1+\rho}\right)}\left(\frac{1+\rho}{1-\rho}\right)^{-i(1+\rho)n}e^{\frac{5i\pi}{6}}H_{\frac{1}{2}}^{(1)}(s) \quad (40a)$$

с тем же значением s , что и в (39a).

Эти выражения упростятся, если перейти к абсолютным величинам и Q . Принимая во внимание, что выражение

$$e^{i\frac{\pi}{2}(p+1)}H_p(is)$$

вещественно при вещественных значениях S (см. Е. Янке и Ф. Эмде, Таблицы функций с формулами и кривыми, Гостехиздат, 1949), найдём:

$$\left. \begin{array}{l} |P|^2 \\ |Q|^2 \end{array} \right\} = \frac{1}{64} \frac{\pi^2}{3} (1-\rho)^2 e^{2pn\pi} \left\{ \begin{array}{l} \alpha'^2 e^{\frac{5i\pi}{6}} H_{\frac{1}{2}}^{(2)}(is) \\ \alpha' e^{\frac{2i\pi}{3}} H_{\frac{1}{2}}^{(1)}(is) \end{array} \right\}^2. \quad (41)$$

Эти выражения были использованы в гл. VII, § 8 при вычислении матричных элементов тормозного излучения для мягких рентгеновских лучей. Они были там (стр. 471) получены путём интегрирования $|P|^2$ и $|Q|^2$ по α' . При этом оказалось, что именно малые значения α' , при которых при большом n произведение $n\alpha'$ и поэтому [см. (39a)] также и аргумент s функций Ганкеля конечны, дают главный вклад в интеграл. Это и послужило основанием того, почему определённую в (38б) величину α' (несмотря на примечание на стр. 682) мы считали конечной и по порядку величины одинаковой с b . Для больших значений α' , для которых $n\alpha'^3$ и s растут до бесконечности, величина α' будет более высокого порядка, чем b . В этом случае в интеграле (38а) можно пренебречь величиной b по сравнению с α' , т. е. в разложении f в (32) можно ограничиться квадратичными членами. Тогда мы вернёмся к проведённому в (34) и (34б) обычному методу переноса, обобщением которого и являются наши вычисления интегралов Эйри.

17. ОТНОСИТЕЛЬНО ПАРАМЕТРОВ КЛЕЙНА α , β , γ , δ И ЗНАЧЕНИЕ ЭТИХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ТЕОРИИ ДИРАКА

К последней части гл. IV, § 6

В теории гироскопа Клейн¹⁾ использовал для представления трёхмерной группы вращения вместо классических углов Эйлера некоторые параметры, введённые ранее Кэли, которые образуют простейшие элементы теории не только в кинематическом, но и в динамическом отношении. Здесь будет показано, что те же самые параметры, обобщённые разумным образом, упрощают также задачи с четырёхмерным вращением (общие преобразования Лоренца) и естественно подводят к спинорному исчислению, часто применяемому в теории Дирака. Предварительно нам необходимо без доказательства привести более старые результаты обычной теории вращения.

А. Параметры α , β , γ , δ в случае трёх измерений. При трёхмерных вращениях минимальный конус (шар с нулевым радиусом) пре-

¹⁾ F. Klein u. A. Sommerfeld, Theorie des Kreisels, Leipzig, гл. I, особенно § 2, 3, 4.

образуется в самого себя. Из равенства $x^3 + y^3 + z^3 = 0$ следует, что $x'^2 + y'^2 + z'^2 = 0$.

Положим:

$$\frac{x + iy}{z} = -\frac{z}{x - iy} = \lambda \quad (1)$$

и соответственно

$$\frac{x' + iy'}{z'} = -\frac{z'}{x' - iy'} = \lambda'. \quad (2)$$

Величины λ и λ' являются обычными комплексными числами. Они характеризуют *направляющие* минимального конуса в их начальном состоянии $x : y : z$ и конечном состоянии $x' : y' : z'$. Между λ и λ' существует взаимно однозначное линейное соотношение

$$\lambda' = \frac{\alpha\lambda + \beta}{\gamma\lambda + \delta}. \quad (3)$$

Параметры $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, так же как и λ, λ' , являются обыкновенными комплексными числами, на которые можно наложить условие

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1. \quad (4)$$

Эти числа удовлетворяют условиям вещественности:

$$\alpha = \delta^*, \quad \beta = -\gamma^* \quad (5)$$

и, следовательно, также

$$\delta = \alpha^*, \quad \gamma = -\beta^*.$$

Отсюда видно, что четыре комплексных параметра $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ зависят лишь от четырёх, а вследствие (4) даже только от трёх определяющих параметров. Число 3 согласуется с мощностью множества ∞^3 возможных действительных вращений.

Сложение двух вращений $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, \delta_1$ и $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, \delta_2$ (последние относятся к положению системы после первого вращения) даёт для параметров результирующего вращения $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ следующее билинейное представление:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \alpha_1\alpha_2 + \gamma_1\beta_2, & \beta &= \beta_1\alpha_2 + \delta_1\beta_2, \\ \gamma &= \alpha_1\gamma_2 + \gamma_1\delta_2, & \delta &= \beta_1\gamma_2 + \delta_1\delta_2. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Это представление может быть использовано для того, чтобы $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ выразить через углы Эйлера ϑ, φ, χ (φ —вращение вокруг оси z , ϑ —вращение вокруг оси, повернутой на φ к оси x , χ —вращение вокруг оси, повернутой относительно оси z на угол ϑ). Это даёт:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \cos \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\chi)}, & \beta &= -i \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\chi)}, \\ \gamma &= -i \sin \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi-\chi)}, & \delta &= \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\chi)}. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Разложим $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ на их вещественные и мнимые части и, принимая во внимание (5), запишем:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= D + iC, & \beta &= -B - iA, \\ \gamma &= B - iA, & \delta &= D - iC. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Ввиду (4) имеем:

$$A^2 + B^2 + C^2 + D^2 = 1. \quad (9)$$

Эти четыре действительных параметра вращения могут быть объединены в кватернион:

$$S = iA + jB + kC + D \quad (10)$$

с правилами счёта (IV.5.9) для i, j, k . Тогда обратный кватернион, определяемый соотношением $SS^{-1} = 1$, будет равен

$$S^{-1} = -iA - jB - kC + D. \quad (11)$$

Радиусы-векторы до и после вращения представим в виде:

$$r = ix + jy + kz \text{ и соответственно } r' = ix' + jy' + z'k. \quad (12)$$

Утверждается, что ортогональное преобразование, определяемое параметрами A, B, C, D , даёт следующую кватернионную формулу:

$$r' = SrS^{-1}. \quad (13)$$

Непосредственно видно, что (13) даёт характерное для ортогональных преобразований соотношение

$$r'^2 = r^2. \quad (14)$$

Выражение (13) является наиболее компактным представлением общего трёхмерного ортогонального преобразования. Для того чтобы получить обычную форму линейных уравнений, в которые не входили бы величины i, j, k , очевидно, необходимо раскрыть правую часть (13) по правилам (IV.5.9) и приравнять друг другу коэффициенты при i, j, k справа и слева. Эти коэффициенты получаются при этом в виде квадратичных форм по A, B, C, D и дают, следовательно, тригонометрические функции половинных углов Эйлера, которые затем могут быть преобразованы к линейным формам тригонометрических функций от целых углов Эйлера.

Б. Параметры $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ в теории преобразований Лоренца. В случае четырёхмерных вращений пространства x, y, z, ict световой конус преобразуется в самого себя. Из $x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 = 0$ следует, что $x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2t'^2 = 0$.

Положим

$$\frac{x + iy}{ct + z} = \frac{ct - z}{x - iy} = \lambda \quad (15)$$

и соответственно

$$\frac{x' + iy'}{ct' + z'} = \frac{ct' - z'}{x' - iy'} = \lambda'. \quad (16)$$

Величины λ и λ' являются обыкновенными комплексными числами. Каждому значению λ соответствует двумерная плоскость, являющаяся пересечением двух трёхмерных плоскостей:

$$x + iy - \lambda(z + ct) = 0 \quad \text{и} \quad \lambda(x - iy) + z - ct = 0.$$

Это пересечение как направляющая пробегает по световому конусу; то же самое можно сказать относительно значений λ' . При вращении (общее преобразование Лоренца) оба семейства направляющих преобразуются взаимно однозначным образом друг в друга. Поэтому обе комплексные плоскости λ и λ' соответствуют друг другу в каждой точке и между ними имеется линейная связь:

$$\lambda' = \frac{\alpha\lambda + \beta}{\gamma\lambda + \delta}. \quad (17)$$

В этом случае величины $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ являются обычными комплексными числами, которые можно нормировать таким образом, чтобы выполнялось условие

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1. \quad (18)$$

Однако ограничение вещественности (5) в этом случае отпадает. Следовательно, в этом случае параметры $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ограничены лишь условием (18). Поэтому они содержат в себе три комплексных и, следовательно, шесть действительных свободных параметров. Это как раз соответствует мощности ∞^6 четырёхмерной группы вращений ($\delta = \frac{4 \cdot 3}{1 \cdot 2}$).

При рассмотрении четырёхмерной группы вращений нас преимущественно интересуют преобразования пространства-времени. Рассмотрим, например, преобразование Лоренца в плоскости z, ct . Это преобразование, как известно, проще всего представляется в виде ¹⁾:

$$x'_3 + ix'_4 = e^{iX}(x_3 + ix_4), \quad x'_2 = x_2, \quad x'_1 = x_1, \quad (19)$$

где через x_1, x_2, x_3, x_4 обозначены x, y, z, ict . Величина X , как это указано на стр. 227, определяется через поступательную скорость v штрихованной системы координат относительно нештрихованной следующим образом:

$$\operatorname{tg} X = i\beta, \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (20)$$

Следовательно, X есть мнимый угол.

Записанные в обычных координатах равенства (19) гласят:

$$z' - ct = e^{iX}(z - ct), \quad x' = x, \quad y' = y.$$

Сравнение с (15), (16) даёт:

$$\lambda' = e^{iX}\lambda \quad (21)$$

и из сравнения с (17), (18) следует:

$$\beta = \gamma = 0, \quad \frac{\alpha}{\delta} = \alpha^2 = \frac{1}{\delta^2} = e^{iX}, \quad (22)$$

$$\alpha = e^{\frac{iX}{2}}, \quad \delta = e^{-\frac{iX}{2}}. \quad (23)$$

Следовательно, и здесь мы наблюдаем характерное появление половинного угла, хотя первоначально в (20) определялся тангенс целого угла X . Так как X чисто мнимо, то α и δ , согласно (23), действительны, а не сопряжены друг другу.

Правило сложения (6) остаётся без изменения. Оно может быть использовано для того, чтобы наряду с перемещением вдоль оси z ввести также и перемещения вдоль оси y или x . При этом возникнет представление величин $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ для сложного преобразования Лоренца, соответствующего представлению (7).

Несмотря на то, что величины α, β уже более не являются сопряжёнными к $\delta, -\gamma$, их можно записать в форме, аналогичной разложению (8), а именно:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= (D' + D'') + i(C' + C''), & \beta &= -(B' + B'') - i(A' + A''), \\ \gamma &= (B' + B'') - i(A' + A''), & \delta &= (D' + D'') - i(C' + C''), \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

¹⁾ Здесь мнимый угол вращения обозначен через X для того, чтобы привести обозначения в соответствие с равенством (IV.6.35).

с условием, что A', \dots, D' должны быть действительными, а A'', \dots, D'' — чисто мнимыми величинами; первые соответствуют обычным трёхмерным вращениям, вторые — пространственно-временным вращениям. Поэтому сопряжённость выражений в (22) является лишь кажущейся, в действительности же, например, ввиду мнимости величин $A'' \dots$ действительные части α и δ , т. е. $D' + iC''$ и $D - iC''$, не равны друг другу. На основании (18) между восемью параметрами A', \dots, D'' имеются ещё два соотношения. Эти соотношения могут быть получены подстановкой (24) в (18) и отделения действительных и мнимых частей:

$$\left. \begin{aligned} A'^2 + A''^2 + B'^2 + B''^2 + C'^2 + C''^2 + D'^2 + D''^2 &= 1, \\ A'A'' + B'B'' + C'C'' + D'D'' &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

(Заметим при этом, что величины $A''^2 \dots$, по определению, являются отрицательными действительными числами.)

Объединим восемь элементов A', \dots, D'' в гиперкомплексной форме. Для этого можно воспользоваться восемью единицами бикватернионной группы из равенства (IV.5.4), которые мы несколько модифицируем и расположим в следующем порядке:

$$\gamma_{23}\gamma_{31}\gamma_{12}, 1; \gamma_{14}, \gamma_{24}, \gamma_{34}, \gamma,$$

где обозначено (отрицательный знак удобен для последующего):

$$\gamma = -\gamma_{1234}.$$

Укажем при этом, что умножение на -1 , как это замечено на стр. 203, должно быть добавлено к группе. Отнесение этих единиц γ к восьми параметрам вращения A', \dots, D'' очевидно: первые четыре должны соответствовать обычным пространственным вращениям (следует обратить внимание на закон образования индексов у γ_{ik}) и должны быть отнесены к параметрам A', \dots, D' ; последние четыре должны соответствовать пространственно-временным вращениям (появление индекса 4) и должны быть в порядке своего расположения отнесены к параметрам A', \dots, D'' .

Следовательно, полагаем:

$$S = \gamma_{23}A' + \gamma_{31}B' + \gamma_{12}C' + D' + \gamma_{14}A'' + \gamma_{24}B'' + \gamma_{34}C'' + \gamma D''. \quad (26)$$

Обратный бикватернион запишется в виде:

$$S^{-1} = -\gamma_{23}A' - \gamma_{31}B' - \gamma_{12}C' + D' - \gamma_{14}A'' - \gamma_{24}B'' - \gamma_{34}C'' + \gamma D''. \quad (27)$$

Для доказательства образуем выражение

$$SS^{-1} = (D' + \gamma D'')^2 - (\gamma_{23}A' + \dots + \gamma_{34}C'')^2.$$

Приняв во внимание, что

$$\gamma^2 = 1, \quad \gamma_{ik}^2 = -1,$$

$$\gamma_{23}\gamma_{14} = \gamma_{14}\gamma_{23} = \gamma_{12}\gamma_{34} = \dots = -\gamma,$$

получим:

$$SS^{-1} = A'^2 + A''^2 + \dots + D'^2 + D''^2 + 2\gamma(A'A'' + \dots + D'D'').$$

Это равно единице ввиду условий (25). Тем самым (27) доказано.

Теперь соберём также и координаты произвольной пространственно-временной точки до и после преобразования Лоренца в виде четырёхмерных

векторов:

$$R = \gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 + \gamma_3 x_3 + \gamma_4 x_4, \quad R' = \gamma_1 x'_1 + \gamma_2 x'_2 + \gamma_3 x'_3 + \gamma_4 x'_4. \quad (28)$$

Утверждается, что общее преобразование Лоренца, определяемое параметрами $A', \dots, D'; A'', \dots, D''$, представляется через бикватернионную формулу в виде:

$$R' = SRS^{-1}. \quad (29)$$

Прежде всего убеждаемся непосредственно, что из (29) получается характерное для лоренц-инвариантности соотношение

$$R'^2 = R^2, \quad (29a)$$

где

$$R^2 = \sum x_i^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 \text{ и т. д.}$$

Кроме того, вычислением можно убедиться, что формула (29) при содержащихся в (26) и (24) соотношениях между S и $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ точно согласуется с представлением преобразования Лоренца, даваемого первоначальными равенствами (15) — (17). Это сейчас будет показано на конкретном примере (30).

Формула (29) опять-таки является наиболее компактной формой записи общего преобразования Лоренца. Если бы мы раскрыли эту формулу, используя соотношения между γ , то путём сравнения коэффициентов при $\gamma_1, \dots, \gamma_4$ в правых и левых частях равенства получили бы линейное представление x' через x с коэффициентами, которые и в этом случае зависели бы квадратично от A', \dots, D'' и могли бы быть представлены в виде тригонометрических функций целых углов Эйлера ϑ, \dots , а также целых мнимых углов вращения θ, \dots

В рассмотренном в (19) частном случае преобразования Лоренца (вращение в плоскости x_3, x_4) общее представление (IV.6.35), записанное с S вместо T , приводится к виду:

$$S = e^{i\pi \frac{X}{2}}, \quad S^{-1} = e^{-i\pi \frac{X}{2}}. \quad (30)$$

Далее, на основании (26) имеем:

$$A' = B' = C' = A'' = B'' = D'' = 0, \\ D' = \cos \frac{X}{2}, \quad C'' = \sin \frac{X}{2},$$

и ввиду (24) можем написать:

$$\alpha = \cos \frac{X}{2} + i \sin \frac{X}{2} = e^{i \frac{X}{2}}, \quad \beta = 0, \\ \gamma = 0, \quad \delta = \cos \frac{X}{2} - i \sin \frac{X}{2} = e^{-i \frac{X}{2}}.$$

Это согласуется с равенствами (22), (23). Одновременно формула (29) после внесения в неё (30) и соответствующего преобразования посредством сравнения коэффициентов при $\gamma_1, \dots, \gamma_4$ даёт точно равенства (19). Следовательно, на этом примере подтверждено согласие между операторным представлением (29) и первоначальным представлением через параметры.

В. Вопросы двузначности, спинорное исчисление. Вместо выбранного в (15) разложения на множители мы могли бы, очевидно, также положить:

$$\frac{x + iy}{ct - z} = \frac{ct + z}{x - iy} = \lambda. \quad (31)$$

Эта величина $\dot{\lambda}$ (обозначение с точкой соответствует спинорному способу написания), как это показывает сравнение с (15), равна $1/\lambda^*$ и, следовательно, не может быть получена из λ при помощи линейного преобразования¹⁾ и поэтому должна быть введена в качестве новой переменной. Точно так же (10) можно заменить соотношением

$$\frac{x' + iy'}{ct' - z} = \frac{ct' + z'}{x' - iy'} = \dot{\lambda}'. \quad (32)$$

Величины $\dot{\lambda}$ и $\dot{\lambda}'$ являются комплексными параметрами второго семейства «производящих» двумерных плоскостей светового конуса, которые при преобразовании Лоренца преобразуются друг в друга. Поэтому и в этом случае имеет место линейное соотношение вида:

$$\dot{\lambda}' = \frac{\dot{\alpha} \dot{\lambda} + \dot{\beta}}{\dot{\gamma} \dot{\lambda} + \dot{\delta}}. \quad (33)$$

Сравнение с равенством, сопряжённым с (17), и учёт связи между $\dot{\lambda}$, $\dot{\lambda}'$ и λ^* , λ'^* приводят к соотношениям:

$$\dot{\delta} = \delta^*, \quad \dot{\gamma} = \beta^*, \quad \dot{\beta} = \gamma^*, \quad \dot{\alpha} = \delta^*. \quad (34)$$

Замена λ через $\dot{\lambda}$ означает в пространстве координат x, y, z, ct преобразование с детерминантом -1 , т. е. на основании (15) и (31) отражение в плоскости z . Собственно группа Лоренца охватывает только преобразование с детерминантом $+1$. Если мы включаем также и отражение, то тем самым расширяем группу Лоренца. Уравнение Дирака инвариантно относительно этой расширенной группы Лоренца. Операции абстрактной теории спиноров, которая была развита как наиболее подходящий для теории Дирака аппарат и впервые приведена в систему Ван-дер-Варденом²⁾, проводятся в пределах этой расширенной группы. Переходя к однородной записи и полагая $\lambda = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$, $\dot{\lambda} = \dot{\lambda}_1/\dot{\lambda}_2$, получим в качестве наиболее общего преобразования спиноров линейную связь между нештрихованными и штрихованными четырьмя величинами $\lambda_1, \lambda_2, \dot{\lambda}_1, \dot{\lambda}_2$, которая в случае собственной группы Лоренца распадается на две пары уравнений:

$$\begin{aligned} \lambda'_1 &= \alpha \lambda_1 + \beta \lambda_2, & \dot{\lambda}'_1 &= \dot{\alpha} \dot{\lambda}_1 + \dot{\beta} \dot{\lambda}_2, \\ \lambda'_2 &= \gamma \lambda_1 + \delta \lambda_2, & \dot{\lambda}'_2 &= \dot{\gamma} \dot{\lambda}_1 + \dot{\delta} \dot{\lambda}_2, \end{aligned}$$

где коэффициенты связаны соотношениями (34).

1) В противоположность трёхмерному случаю, где при соответствующей перегруппировке в (1) соответствующая величина $\dot{\lambda}$ становится равной $-\lambda$.

2) В а н д е р-В а р д е н и, Метод теории групп в квантовой механике, Харьков, 1938.

АЛФАВИГНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Абсорбция в атмосфере звезд** 478
Азимутальное квантовое число по Дираку 234, 239, 240, 243
Амальды 586
Амплитуда вероятности 52, 173
Аномальный эффект Зеемана 362
Антисимметрия собственных функций 551
Араки 351, 553
Атом водорода 70
 —, ион отрицательный 574, 575
Атомный фактор 340, 511

Бальмера серия, интенсивность 90
 — терм 72
Баркла опыты 287
Бартон 476
Бекер 582
Бесселя функция 25
Бете 343, 348, 399, 406, 575
Бете — Гайтлера формула 467
Бете 270, 468
Бечер 253, 597
Бикватернионов группа 205, 233, 688
Блатон 612
Блекет 564
Блох 518, 588
Бовен 60
Бозе статистика 525, 557, 560
Бом 451
Бора магнетон 98, 189
 —, волновомеханическое ана-
 чение 98
Борн 51, 161
 — приближение 328
 —, условие применимости 335
Боте 468, 460
Бриллуэн 588, 592
Буркхардт 518, 519
Буш 582, 591

Валлер 307, 480
Ван-дер Варден 690
Вариационный принцип 567, 606, 609, 665
 —, в теории Дирака 665
 —, в форме Шредингера 609
 —, применение в методе Хил-
 лерааса 567
**Вейль, калибровочная инва-
 рриантность** 606
 —, ортогональность и норми-
 ровка собственных функций
 непрерывного спектра 108
Велькер 350
**Вентцель, удар электронный ре-
 лативистский** 566
 —, формула рассеяния 398
 —, фотоэффект 372, 373
 —, эффект Комптона на свя-
 занных электронах 480, 507,
 511
 —, эффект Штарка второго по-
 рядка 307
**Вентцеля — Крамерса — Бриллиу-
 эна метод** 592, 597

Вероятности амплитуда 52, 173
Вигнер 588
Вигнер, теория групп 371, 525
Вильямс 384
 —, электронный удар 566
Вин 423
**Виривла теорема в волновой ме-
 ханике** 148, 656
Водорода атом 70
 —, ион отрицательный 574,
 575
 —, молекула 553
 —, ион положительный 574,
 576
Воллан 512, 516
Волновое уравнение 12, 40
 — для сил без потенциала 41
 —, зависящее от времени 43,
 44
Волновой пакет 141
Вращательная полоса 129
**Вращательно колебательный
 спектр** 129
Вращательный спектр 129
Вырождение 73, 580
 — в теории возмущений 297, 363
 — обменное 526

Гайтлер 270, 468
Гамильтона механика и оптика
 10
 — оператор 41, 145, 150
 — функция электрона 603
**Гамма функция, интегральное
 представление** 631, 632
Ганкеля функция 27, 472
 — как предельный случай
 гипергеометрической функции
 683
**Гаудсмит и Улленбек, гипотеза
 о спине** 189
**Гауссово распределение вероят-
 ностей** 141
Гебауэр 308
Гейгер 480
**Гейзенберг, комптоновское рас-
 сеяние** 512
 —, матричная механика 161
 —, соотношение неопределенно-
 стей 170
 —, спектр гелия 523 и др
Гелия спектр 523 и др
 —, обменное вырождение 526
 —, орто и парасостояния 526
Геллман 289
Герни 135
Герцман 566
Герца диполь 59 и др
Гипергеометрическая функция 76
 —, асимптотическое поведе-
 ние 674, 677
 —, вырожденная 77
 —, интегральная представле-
 ние 674, 677
Гиперкомплексные единицы 186
 —, матричное представление
 660
 —, систематика 215, 232
 — γ -единицы 203, 205

Гомбаш 588
**Гордон, интенсивность комито-
 новской линии** 479
 —, формула тонкой структуры
 239
 —, четырехмерный вектор тока
 в теории Дирака 197
Грнна теорема 45
 — для собственных функций
 дискретного спектра 635, 638
 —, непрерывного
 спектра 107
 —, обобщенная форма 608
 — функция 330
Гронвальд 526
Группа бикватернионов 205, 233,
 688
 — кватернионов 205, 233
 — Лоренца 690
Групповая скорость 93, 598
Группы изоморфные 205

Даймеид 288
Данхем 599
Дарвин 25, 239, 362
Двойственность принцип 13
Дебля 512
Де Бройль 13
Делитель нуля 210
 —, нормированный на единицу
 212
 — самосопряженный 212
 — степени $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots$ 211
Деннисон 555
**Деполаризация рентгеновских лу-
 чей** 434, 441
Десландра терм 129
Детерманн 462
Джентиль 586
Джермер 13, 343
Джонсон, закон подобия 399
Диамгнетизм 91, 99, 586
Диамгнитный момент атома 100
Диполь Герца 59 и др
Дирака теория возмущений 324
 — уравнение 187
 — для плоской волны 199
 —, инвариантность относи-
 тельно преобразований Лоренца
 219
 —, итерация 233
 —, обменный эффект 587
 —, плотность, ток 197
 — сопряженное 195
Дисперсионная формула 313, 314
Дисперсия 308
Дистель 335
Дифференциал собственный 108
Дэвиссон 13, 343
Дю-Монд 516

Егер 468
Единицы гиперкомплексные 166
 —, матричное представление
 660
 — Хартри 128

Задача Кеплера 70
 —, правило отбора 86

- Задача Кеплера, формула тонкой структуры 229, 667
 Закон движения центра тяжести 146, 655
 — площадей 146, 555
 — подобия 399
 Завтер 32 215 249, 275, 288, 374
 Земана эффект 91
 — — аномальный 362
 — — при дипольном и квадрупольном излучении 612, 613, 622
 Зейтц 588
 Иенсен 588
 Излучение дипольное 59, 616
 — — магнитное 618, 621
 — — квадрупольное 60, 610, 612, 616
 — —, правила отбора 619
 — — мультипольное 60, 610
 — — октупольное электрическое 60
 Изотропные группы 205
 Импульсный оператор 40, 143
 Инвариантность калибровочная 606
 Интеграл обменный 531
 — — по двойному контуру 673
 — — Эри 683
 Интегральное представление функций 631, 632
 Интенсивность в сплошном рентгеновском спектре 434
 — — излучения осциллятора 63
 — — линии Комптона 480
 — — линий 556, 560
 — — перехода 54
 — — серии Бальмера 90
 Итерация уравнения Дирака 233
 Казимир 513
 Калибровочная инвариантность 606
 Каппеллер 519
 Квадрупольное излучение 60, 610, 612, 616
 — —, правило отбора 619
 Квантовые числа, переход от дираковских к шредингеровским 240
 Кватернионы группа 205, 233
 Кватернионы 686
 Кеплера задача 70
 — — правило отбора 86
 Кичуки 344
 Киркпатрик 479, 518
 Кирхнер 373, 374
 Клейн О 181, 308
 Клейн Ф 684
 Клейна — Нишны формула 504
 Клейна парадокс 270, 275
 Клиффорда теорема 605
 — — числа 215
 Комбинационное рассеяние 321
 — —, правило отбора 322
 Комбинаторный спектр 521
 Коммутирующие операторы 150, 154, 230
 Комптона линия, интенсивность 480
 — — полоса 521
 — — эффект 479 486
 — —, длина волны 479
 — —, метод запаздывающих потенциалов 489
 — —, — матричных элементов 381
 — — на связанных электронах 479, 507
 — —, ширина линии 513
 Комптоновское рассеяние 512
 Кондон 613
 Корк 522
 Коссель, обменные силы 524
 Коэффициент отражения 29, 274
 — — поглощения в К-оболочке 395
 — — прохождения 275
 Крамерс 424, 474, 592, 597, 634
 Кратные собственные значения 297
 Кратцер 131, 641
 Криволинейные координаты 644
 Куленкамф 421, 442, 451
 Кун 315
 Кэмпбелл 614
 Кюри И и Жюлио Ф 269
 Кюри постоянная 100
 Лагерра полиномы 612
 — —, асимптотическое поведение 105
 — —, интегральное представление 102
 — —, ортогональность и нормировка 75
 — —, производящая функция 631
 — —, связь с гипергеометрической функцией 76, 104
 Ладенбург 308
 Лаймана серия, интенсивность 87
 Ландсберг 322
 Ланжевена формула для диамагнетизма 99
 Лапорта правило 611, 621
 Лармора прецессия 92
 — —, угловая скорость 93
 Лежандра шаровая функция 22
 Ленц 588
 Линии небуля 60
 — — северного сияния 612
 Лондон 606
 Лоренца группа 690
 — — преобразование 228
 — — вывод формулы Де Бройля 16
 Льюиса модель восьмизлектронных оболочек 126
 Магнитон Бор 98, 189
 — —, волновомеханическое значение 98
 Магнитный момент электрона 186, 189
 Майер—Лейбниц 480
 Макленан 615
 Малюса опыт 288, 292
 Мандельштам 322
 Масса позитрона 270
 Матрица эрмитова 54, 163
 Майорана 586
 Матричная механика 161
 Матричное умножение 162
 Матричный элемент 52
 — — в представлении Дирака 55
 Мауэ 350, 474
 Мейкснер 357
 Мейснер 239
 Мейтнер 506
 Мембраны колебания, кратные собственные значения 297
 Мессис 341, 444
 Метод Вентцеля—Крамерса—Бриллуэна 592, 597
 — — запаздывающих потенциалов 489
 — — перевала 391, 680
 — — полноволнов 22, 599
 — — самосогласованного поля 589
 — — стационарной фазы 591
 — — Хартри—Фока 591
 — — Хиллерааса 567
 — — электродинамических потенциалов 55
 Молекула водорода 553
 — —, нон положительный 574, 576
 — —, симметричный волчок 135
 Момент диамагнитный атома 100
 — — магнитный электрона 186, 189
 — — парамагнитный атома 100
 — — в случае незамкнутых оболочек 126
 — — электрический 53
 Морзе формула 641
 Мотт 861
 — —, «двойное рассеяние» 288
 — — формула 341
 Мультипольное излучение 60, 610
 Небуля линии 60, 612, 614
 Неопределённости соотношение 167, 170, 171
 Невзрывное столкновение 332
 Нормировка волновой функции 48, 632
 — — и ортогональность собственных функций дискретного спектра 634
 — — — — непрерывного спектра 107, 634
 — — радиальных дираковских функций 253
 Обменное вырождение 526
 Обменные силы 524
 Обменный эффект 523
 — — в атоме Юмаса — Ферми 587
 — — в молекуле водорода 536, 549
 — —, метод Хартри—Фока 591
 Образование пар 269
 Оже 374
 Октупольное электрическое излучение 60
 Оператор Гамильтона 14, 145, 150
 — — импульса 40, 143
 — — момента количества движения 153, 156, 636
 — — полного момента количества движения 230
 — — сопряжённый 158
 — — спина 189, 283
 — —, среднее значение 143, 146
 Оператора диагональная форма 155
 Операторы коммутирующие 150, 154, 230
 Оппенгеймер 424
 Опыт Баркла 287
 — — Малюса 288, 292
 Ортогональности условие 49, 75
 — — в теории возмущений 294, 300
 — — радиальных дираковских функций 253
 Ортогональность и нормировка собственных функций 107, 634
 Орто и параводород 553
 Орто и паратермы атома гелия 521, 530
 Осциллятор в матричной механике 161
 — — в плоскости и пространстве 36
 — — линейный гармонический 34
 — —, ортогональность собственных функций 62
 Осциллятора интенсивность излучения 63
 — — сила 313
 Отдача при фотоэффекте 388
 Отклонение электронов вперед 383
 Отражение полное 276
 Отражения коэффициент 29, 274
 Параболические координаты 114, 301
 Парадокс Клейна 270, 275
 Пара- и ортоводород 553
 Пара и ортотермы атома гелия 521, 530
 Парамагнетизм 91, 100
 Парамагнитный момент атома 100
 — — в случае незамкнутых оболочек 126

- Паули и Вейскопф, плотность заряда 184
 — принцип 525, 549
 — уравнение 193, 205
 — , приближённое решение 209, 236
 Периодическая система 583
 Плачех 323
 Плотность и ток, математическое ожидание 51
 — спин как четырёхвектор 224
 — частиц 45
 — — релятивистская 184, 196
 — — смешанная 49
 Поглощения коэффициент в К-оболочке 395
 Позитрон 268
 — масса 270
 Полиномов метод 22, 599
 Полиномы Лагерра 74
 — , асимптотическое представление 105
 — , интегральное представление 102
 — , ортогональность и нормировка 75
 — , производящая функция 631
 — , связь с гипергеометрической функцией 76, 104
 — Якоби 140
 Поляризации правило 54
 Поляризация волн материи 282
 — в сплошном реактивном спектре 434
 Поперечное сечение дифференциальное 332
 — — полное 332
 — — при тормозном излучении 468
 Порог потенциальный 27, 30
 Постоянная Кюри 100
 Поток частиц 45
 — — релятивистский 184, 196
 Правила отбора 54
 — — в теории Дирака 254
 — — для гармонического осциллятора 322
 — — мультипольного излучения 610, 619
 — — магнитного излучения 621
 Правило Лапорта 611, 621
 — поляризации 54
 — сумм 314
 Преобразование Лоренца 226
 — спиорное 229, 690
 Прессия Лармора 92
 — , угловая скорость 93
 Приближение Борна 328
 Принцип вариационный 606, 609
 — — в теории Дирака 663
 — — в форме Шредингера 609
 — — применение в методе Хиллерааса 567
 — двойственности 13
 — дополнителности 13
 — Паули 525, 549
 Прицельное расстояние 342
 Прозрачность 29, 275
 Пространство конфигурационное 50
 Процесс поглощения 478
 Разетти 323, 586
 Раман 322
 Рассеяние комбинационное 321
 — — правило отбора 322
 — — одинаковых частиц 560
 — — релеевское 321
 Раш фон Траунберг 308
 Резерфорд формула 336
 — — обобщение на случай нейтрального атома 339
 Резонансная катастрофа 295
 Рей 522
 Рейнольдс, групповая скорость 599
 Рейхе 135
 Рекуррентная формула двухчленная 601
 — — трёхчленная 603
 Релеевское рассеяние 321
 Релей 294
 Ресселли—Савидерса связь 611
 Ридберга поправка 122
 — постоянная 85
 — терм 122
 Рикати уравнение 592
 Ритц 574
 Рихардсон 423, 539
 Робертсон 651
 Ромберг 574
 Росс 479, 518
 Ротатор в плоскости 38
 — в пространстве 37
 Рубинович 62, 614, 615
 Самоспряжённость, общие условия 607
 Свартхольм 578
 Сегре 613, 614
 Серии спектральные одного оптического электрона 120
 Серия Лаймвана, интенсивность 87
 Сечение поперечное дифференциальное 332
 — — полное 332
 — — при тормозном излучении 468
 Сила осциллятора 313
 Силы обменные 524
 Симметрия сферическая замкнутых оболочек 124
 — — плотности в теории Дирака 254
 — — термов 82
 Система периодическая 583
 Скорость групповая 15, 598, 599
 — фазовая 14
 Сmealь 321
 Соотношение неопределённостей 167
 — — гауссово распределение 169
 — — , связь с фазовым интегралом 170
 Сопряжённое дифференциальное выражение 46, 607
 Сопряжённый оператор 158
 Спектр вращательно-колебательный 129
 — вращательный 129
 — гелия 523 и др.
 — — , обменное вырождение 526
 — — , орто — парастатистичности
 — непрерывный водорода 101
 Спин электрона 190, 193
 Спина оператор 189, 283
 — плотность как четырёхвектор 224
 Спиновая поправка 348
 Спиорное исчисление 690
 — преобразование 229, 690
 Среднее значение оператора 143, 146
 Статистика Бозе 525, 557, 560
 — Ферми 525, 557, 560
 Статический октет 126
 Стоксова и антистоксова части в эффекте Комптона 483
 Столкновение неупругое 332
 — — упругое 331
 Сугнура 524, 548
 Такамии 308
 Теллер 576
 Темпель 215, 248
 Теорема вращала в волновой механике 148, 656
 Теорема Грина 45
 — — для собственных функций дискретного спектра 635
 — — — — непрерывного спектра 107
 — — , обобщённая форма 608
 — — Клиффорда 665
 Теория возмущений Дирака 324
 — — , применение к фотоэффекту 406
 — — Шредингера 293
 — — дисперсии 308, 314
 — — представлений 171
 — — столкновений 328
 — — , неупругий удар 332
 — — , упругий удар 331
 Терм Вальмера 72
 — Десландра 129
 Тобауд 270
 Ток, определение 47
 — в теории Дирака 197
 — смешанный 49
 Ток в вектор четырёхмерный 195, 197
 Томас 578
 Томсон 288, 344
 Торможение протона 475
 Туннельный эффект 31
 Удар неупругий 332
 — упругий 331
 Уизольд 478
 Уравнение волновое 12, 40
 — — для сил без потенциала 41
 — — , зависящее от времени 43, 44
 — Дирака 187
 — — для плоской волны 199
 — — , инвариантность относительно преобразований Лоренца 219
 — — , интерация 233
 — — , обменный эффект 587
 — — , плотность, ток 197
 — — сопряжённое 195
 — — непрерывности 47, 182, 195
 — Паули 193, 205, 209
 — Шредингера релятивистское 179
 Уровни энергии отрицательные 259
 — — — — электрона 267
 Фазовая скорость 14
 Фахтор атомный 340, 511
 Фаулер 589
 Ферми 578, 584, 585
 — статистика 525, 527, 560
 Фишер 374
 Фогт 370
 Фок 591, 606
 Формула Бете—Гайтлера 467
 — дисперсионная 313, 314
 — Клейна—Нишины 504
 — Ланжевена для диамагнетизма 99
 — Морзе 641
 — Мотта 341
 — рассеяния 338
 — Резерфорда 336 и д.
 — рекуррентная 601, 603
 — тонкой структуры 229, 239, 353, 667
 Фотоэффект 372, 373
 — в оболочке 401
 Фразер 123
 Франц 215, 232, 513, 522
 Френкель 190, 406
 Френкис 614
 Функция Бесселя 25
 — Ганкеля 27, 472
 — — как предельный случай гипергеометрической функции 683
 — гипергеометрическая 76, 77, 247

- Функция гипергеометрическая, асимптотическое поведение 674, 677
 — —, интегральное представление 672, 673
 — Грина 330
 — Лежандра шаровая 22
 — шаровая 19, 22, 24, 64, 78, 140, 625, 632
 — электрона Гамильтона 603
 Фюсс 108, 344

 Хансен 553
 Характер антисимметрии 550
 Хартри единицы 128
 Хартри—Фока метод 591
 Хиллерааса метод 567
 Хунд 140, 588
 Хупфельд 506
 Хустон 239
 Хьюлтен 586

 Цаан 597

 Чадавик 557, 564
 Чао 578
 Частота рассеянного излучения 321
 Чемпион 563, 564
 Числа Клиффорда 215
 Число квантовое азимутальное по Дираку 234, 239, 240, 243
 — нулей ортогонального полинома 82

 Число нулей радиальной собственной функции 81

 Шаровая функция 19, 22, 24, 140
 — —, второго рода 632
 — —, нормировка 64
 — —, производящая функция 625
 — —, рекуррентная формула 625
 — —, связь с гипергеометрическими функциями 78
 — —, собственные значения 22
 — —, теорема сложения 125
 Шварцшильд 477
 Шерцер 389, 425
 Шестивектор γ_μ , 223

 Шлатерер 371
 Шнайрт 517
 Шредингер 10
 —, теория возмущений 293
 Шредингера уравнение релятивистское 179
 Штарка эффект 301
 — — высшего порядка 305, 309

 Эвальд 348
 Эддингтон 215
 Эйри интеграл 683
 Эккарт 32
 Электрона магнитный момент 186, 189

 Электрона спин 190, 193
 Эмден 586
 Энергия уровни отрицательные 259
 — — электрона 267
 Эрнфеста теорема 148
 Эрмита полиномы 33
 — —, нормировка 61
 — —, производящая функция 631
 — —, связь с вырожденной, гипергеометрической функцией 78
 Эрмитова матрица 54, 163
 Эффект Зеемана 91, 362, 612, 622
 — Комптона 479, 486
 — обменный 523
 — — в атоме Томаса—Ферми 587
 — — в молекуле водорода 536
 — —, метод Хартри—Фока 594
 — туннельный 31
 — Штарка 301
 — — высшего порядка 305, 309

 Юкава 471
 Юри 557

 Якоби полиномы 140

Зоммерфельд Арнольд

СТРОЕНИЕ АТОМА И СПЕКТРЫ

Редакторы: *В. Т. Хозяинов* и *Ю. М. Бутусов*

Техн. редактор *Н. А. Тумаркина*

Корректор *Г. Г. Желтова*

Сдано в набор 21/1 1956 г. Подписано к печати

24/VII 1956 г. Бумага 70×108/16. Физ. печ. л. 43,5.

Услови. печ. л. 59,59. Уч.-взд л. 52,42.

Тираж 10000 экз. Т-04429. Цена книги 28 р. 20 к.

Заказ № 968

Государственное издательство
технико-теоретической литературы
Москва, В-71 Б Калужская, 15.

Министерство культуры СССР. Главное управление
полиграфической промышленности.
4-я типография им. Евгении Соколовой.
Ленинград, Измайловский пр., 29

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТЕХНИКО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
„ГОСТЕХИЗДАТ“

ИМЕЮТСЯ В ПРОДАЖЕ КНИГИ:

- Веселов М. Г., Элементарная квантовая теория атомов и молекул, 1955, стр. 184, ц. 3 р. 95 к.
- Власов А. А., Макроскопическая электродинамика, 1955, стр. 228, ц. 5 р. 40 к.
- Вонсовский С. В. и Шур Я. С., Ферромагнетизм, 1948, стр. 816, ц. 30 р. 80 к.
- Гольданский В. И., Новые элементы в периодической системе Д. И. Менделеева. Издание второе, переработанное и дополненное. 1955, стр. 168, ц. 2 р. 85 к.
- Грошев Л. В. и Шапиро И. С., Спектроскопия атомных ядер, 1952, стр. 440, ц. 17 р. 40 к.
- Ельяшевич М. А., Спектры редких земель, 1953, стр. 456, ц. 21 р. 60 к.
- Льюис В. Б., Методы электрического счёта альфа- и бета-частиц. Перевод с англ. Н. Н. Воронова, под ред. Г. Д. Латышева. Изд. 2-е, 1949, стр. 164, ц. 3 р. 85 к.
- Фок В. А., Теория пространства, времени и тяготения, 1955, стр. 504, ц. 16 р. 85 к.

Книги продаются в книжных магазинах и высылаются также почтой наложенным платежом, без задатка всеми республиканскими, краевыми и областными отделениями «Книга — почтой».