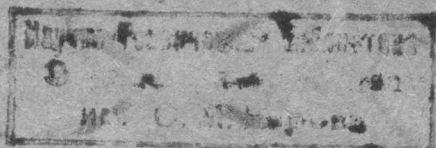


Луи де Бройли

МАГНИТНЫЙ  
ЭЛЕКТРОН

ТЕОРИЯ ДИРАКА



О Н Т И — Д Н Т В У — Н К Т И

537.1  
Б.88

ЛУИ ДЕ БРОЙЛИ

538

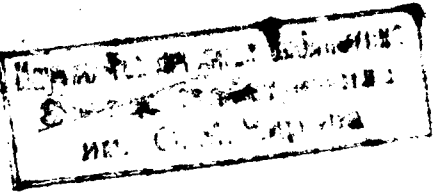
# МАГНИТНЫЙ ЭЛЕКТРОН

(ТЕОРИЯ ДИРАКА)

ПЕРЕВОД С ФРАНЦУЗСКОГО  
П. СИЛАКОВА

ПОД РЕДАКЦИЕЙ  
Е. М. ЛИФШИЦА

21344



Библиографическое описание этого  
издания помещено в „Літописі Укра-  
їнського Друку“, „Картковому  
Репертуарі“ и других указателях  
Української Книжної Палати

41 - 5 - 4

LOUIS DE BROGLIE

L'ÉLECTRON MAGNÉTIQUE

(THÉORIE DE DIRAC)

PAR

MEMBRE DE L'INSTITUT  
PROFESSEUR A LA SORBONNE  
LAUREAT DU PRIX NOBEL

Ответственный редактор *К. Р. Иршенко*  
Техоформление — *Л. Л. Маргулис*  
Корректор *В. Кемарская*

Типо - цинкография ДНТБУ, Харьков, Суздальские ряды, 18/20. Уполномоченный  
Главлита № 3291. Зак. № 01278. Тираж 3500. 15 печ. лист. В печат. листе 52.000 зн.

Бумага 62 × 94. Вес 1 метр. стопы 38 кг.

Сдано в производство 25/VIII—35 г. Подписано к печати 14/XII—35 г.

## ОТ ИЗДАТЕЛЬСТВА

Теория Дирака была создана сравнительно недавно; основное уравнение своей теории Дирак предложил лишь в 1928 г. Эта теория, являющаяся первым шагом к объединению двух основных теорий современной физики, — теории относительности и волновой механики, — получила в последние годы блестящее развитие, когда ряд ее выводов подтвердился опытом. В частности, знаменитая теория „дырок“ Дирака получила подтверждение открытием электронов с положительным зарядом — позитронов. Все это придало теории Дирака весьма существенное значение в современной теоретической физике.

Правда, она не является вполне совершенной теорией, объединяющей волновую механику с теорией относительности. Построение такой теории — релятивистской теории квант, а вместе с ней и квантовой электродинамики, пока еще дело будущего. Трудно сказать сейчас, в каком виде войдет в эту будущую теорию теперешняя теория Дирака. Но все это однако не лишает в настоящее время теорию Дирака большого значения, как теорию, объяснившую ряд новых вопросов, подтвердившихся опытом.

Предлагаемая вниманию читателя книга, автором которой является один из основоположников волновой механики, представляет собой блестящее изложение теории Дирака и ее различных применений; кроме того в ней кратко изложены основные принципы волновой механики.

---



## ПРЕДИСЛОВИЕ

Теория электронов Дирака представляет огромный интерес с нескольких точек зрения. Она является наиболее совершенной из имеющихся форм волновой механики электрона; она примиряет, по крайней мере до некоторой степени, идеи теории относительности с квантовыми концепциями, в форме, вполне согласующейся с принципами новой физики; она уточняет такую плодотворную гипотезу электрической, магнитной и вращающейся частицы Уленбека и Гаудсмита; наконец, она дает возможность, поскольку это касается и тонкой структуры спектров и аномальных эффектов Зеемана, объяснить очень важные экспериментальные данные, в чем и она, в свою очередь, находит себе блестящее подтверждение. Редактируя курс, который мы читали последние годы в Институте Анри Пуанкаре, нам представилось небесполезным опубликовать общий очерк упомянутой теории.

Чтобы доказать, что теория Дирака не является простой игрой досужего теоретика, а что она является очень кстати, давая возможность объяснить важные явления, мы считаем нужным в первой части книги дать обзор явлений, которые получили благодаря настоящей теории вполне удовлетворительное объяснение, тогда как эти же явления не поддавались объяснению ни при помощи прежней квантовой теории, ни даже при помощи волновой механики в ее первоначальной форме.

В этой первой части нашей работы мы точно также уделили немного места для того, чтобы напомнить общие принципы новой механики и изложить вытекающие из нее физические законы. Ибо не представляя себе наглядно этих принципов, совершенно невозможно как следует понять теорию Дирака.

В изложении теории, являющейся объектом второй части, мы сохранили несколько асимметричную форму уравнений, употребляемую с самого начала самим Дираком, не пытаясь дать более симметричных с точки зрения теории относительности обозначений, как это делали впоследствии многочисленные авторы. Это искание симметрии формы, нам кажется несколько тщетным, поскольку, как это мы попытались показать в последней главе, теория Дирака, несмотря на инвариантность уравнений по отношению к преобразованию Лоренца, должна будет в свое время сыграть особенную роль, чтобы остаться в согласии с основными главнейшими принципами квантовой физики. В конце второй

## ПРЕДИСЛОВИЕ

части мы посвятили одну главу систематическому обзору теории в целом, чтобы помочь читателю воспринять ее как гармоническое целое.

Третья часть работы посвящена объяснению с точки зрения теории Дирака экспериментальных данных, упоминаемых в первой части. Далее идет изложение некоторых несколько необычных выводов из основных уравнений, особенно в отношении состояний с отрицательной энергией. Мы изложили эти трудности, не давая никакого решения. Каким бы образом они ни разрешились в будущем, они заслуживают того, чтобы их изучить, так как их корни идут к самым основам теории.

Мы надеемся, что вся работа в целом даст возможность читателю сразу оценить красоту теории Дирака, ее полезность в смысле объяснения экспериментальных данных, а также понять ее пробелы и слабые места.

Выражаю глубокую признательность Жан Луи Детуш за оказанную им помощь в чтении корректуры.

*Луи де Бройли*

Глава I

**Атомный спектр водорода  
Теории Бора и Зоммерфельда**

**1. Формула Бальмера и спектральные термы водорода**

Из всех серий линий видимого спектра водорода ранее всех стала известной серия Бальмера. Она составляется из четырех главных линий (которые в действительности являются узкими дублетами, как мы в этом убедимся позднее). Вот названия и длины волн этих четырех линий:

$$H_{\alpha}: 6.563 \text{ \AA} \quad H_{\beta}: 4.861 \text{ \AA} \quad H_{\gamma}: 4.340 \text{ \AA} \quad H_{\delta}: 4.102 \text{ \AA}$$

Еще полвека тому назад Бальмеру удалось отыскать формулу, дающую частоты этих линий. Эта формула представляется в следующем виде:

$$\nu_m = R \left[ \frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right] \quad m = 3, 4, 5, 6 \quad (1)$$

где  $\nu_3$  --- частота линии  $H_{\alpha}$ ,  
 $\nu_4$  --- частота линии  $H_{\beta}$  и т. д.

$R$  --- константа, называемая „константой Ридберга“, с большой точностью равная  $3,29201 \cdot 10^{15}$ .

Прочие открытые позже серии линий невидимого спектра водорода следуют аналогичным законам. Таковы, например, ультрафиолетовая серия Лимана, для которой частота линий дается формулой:

$$\nu_m = R \left[ 1 - \frac{1}{m^2} \right] \quad m = 2, 3 \dots \quad (2)$$

и инфракрасная серия Пашена, для которой:

$$\nu_m = R \left[ \frac{1}{9} - \frac{1}{m^2} \right] \quad m = 4, 5 \dots \quad (3)$$

Отсюда видно, что все эти формулы приводятся к общему типу

$$\nu = R \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right] \quad n < m \quad (4)$$

Для линий серии Лимана  $n = 1$ ; серии Бальмера  $n = 2$ ; серии Пашена  $n = 3$ .

На основании сказанного можно прийти к общему закону, оказавшемуся справедливым в отношении всех спектральных линий всех тел. Это — „комбинационный принцип Ритца“, который гласит так:

„Частота любой спектральной линии равна разности двух характеристических спектральных термов излучающего тела“.

Или в другой форме:

„Для всякого излучающего тела можно составить таблицу чисел, называемых спектральными термами, таким образом, что частота каждой спектральной линии тела будет представлять собой разность двух из этих спектральных термов“.

Таким образом, формула (4) показывает, что для водорода спектральные термы, по крайней мере по их абсолютному значению, имеют вид  $\frac{R}{n^2}$  при  $n = 1, 2, \dots$

Более углубленное экспериментальное изучение линий серии Бальмера показало, далее, что в действительности каждая из этих линий образуется двумя очень близкими линиями. Иначе говоря, анализируя серию Бальмера с достаточной степенью дисперсии, мы замечаем, что каждая линия, принимавшаяся вначале за простую, в действительности является узким дублетом. Для каждого из этих дублетов разность частоты между двумя составляющими одна и та же. Позднее мы увидим, как Зоммерфельду удалось объяснить эту тонкую структуру серии Бальмера.

## 2. Теория Бора для спектральных термов водорода

В 1912 году Бору удалось объяснить спектральные термы водорода и, исходя из этого, построить на совершенно новых основаниях современную теорию атома.

Несколько ранее появления теории Бора физики, не без некоторого колебания, кончили, согласно предположению Резерфорда, на том, что приняли планетарную модель атома. Согласно с этим взглядом, атом простого тела, место которого в системе Менделеева обозначается через  $N$ , имеет центральное ядро с положительным зарядом  $Ne$ , причем  $e$  представляет собой элементарный электрический заряд  $+4,77 \cdot 10^{-10}$  электростат. единиц; вокруг этого ядра вращается  $N$  электронов с зарядом  $-e$  таким образом, что атом в целом является электрически нейтральным. Бору пришла в голову мысль вычислить эту модель атома, применяя к ней законы теории квантов, с успехом введенные Планком при изучении черного излучения. Он предположил, что планетарный электрон в атоме может описывать около положительного центрального солнца только определенные движения, предусмотренные классической механикой. Этим стабильным движениям электронов в атоме соответствуют „стационарные состояния“, во время которых, в про-

тивовес предсказаниям классической электродинамики, не может происходить никакого излучения. Таким образом, испускание спектральных линий может иметь место только во время мгновенных переходов атома из первоначального стационарного состояния в другое стационарное состояние с меньшей энергией.

Какова же будет частота линии, испускаемой во время такого перехода?

Бор определяет ее, допуская, что потерянная атомом энергия излучается в форме одного только кванта света с энергией  $h\nu$ , в форме одного фотона, выражаясь современным языком. Таким образом, если  $E_i$  и  $E_j$  означают энергию атома в первоначальном стационарном состоянии и в конечном стационарном состоянии, то частота  $\nu_{ij}$  излучения во время перехода из одного состояния в другое представится в виде

$$\nu_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} \quad (5)$$

Эта формула непосредственно объясняет принцип комбинирования Ритца и показывает, что спектральные термы атома равны энергиям его различных стационарных состояний, разделенным на постоянную Планка.

Следовательно, существенной задачей является определение энергии стационарных состояний. Для этого в своей первоначальной работе Бор делает допущение, что электрон ведет себя, как точечный заряд, подчиняющийся законам динамики Ньютона, но в то же время он ограничивает количество возможных движений, вводя правила квантования Планка. В то время, когда это писалось Бором, квантовать умели только периодические движения, определяемые одной переменной  $q$ . Метод квантования для этого случая был таков: имея  $p$ , представляющее собой момент Лагранжа, сопряженный с координатой  $q$ , писали:

$$\oint p dq = nh \quad (n \text{ целое}) \quad (6)$$

При этом интеграл распространялся на весь период движения, а  $h$  есть постоянная Планка. Вполне естественно, Бор пришел к предположению, что движения электрона, удовлетворяющие условию (6), являются устойчивыми движениями, соответствующими стационарным состояниям атома.

Этот метод позволяет легко вычислить энергию устойчивых круговых траекторий атома водорода, который, в представлении Резерфорда, образуется из ядра с зарядом  $+e$  и из планетарного электрона с зарядом  $-e$ . Если  $\theta$  обозначает азимут, который отмечает положение электрона на круговой траектории радиуса  $r$ , условие (6) дает:

$$m r^2 \dot{\theta} = n \cdot \frac{h}{2\pi} \quad \left( \dot{\theta} = \frac{d\theta}{dt} \right) \quad (7)$$

Это равенство означает, что момент вращения электрона на устойчивой орбите есть целое кратное  $\frac{h}{2\pi}$ . Поскольку, с другой стороны, законы динамики дают соотношение:

$$m r \dot{\theta}^2 = \frac{e^2}{r^2} \quad (8)$$

для энергии  $n$ -ого квантованного кругового движения легко находим:

$$E_n = \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 = -\frac{2 \pi^2 m e^4}{n^2 h^2} \quad (9)$$

Следовательно, если ограничиваться круговыми движениями, спектральные термы водорода должны быть вида:

$$\frac{E_n}{h} = -\frac{2 \pi^2 m e^4}{n^2 h^3} \quad (10)$$

По формуле (5) линии водорода должны иметь частоты, определяемые из общего соотношения:

$$\nu_{nn'} = \frac{2 \pi^2 m e^4}{h^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad (n' > n) \quad (11)$$

и мы снова возвращаемся к формуле (4), выведенной экспериментальным путем, допуская, что:

$$R = \frac{2 \pi^2 m e^4}{h^3} \quad (12)$$

Таким образом, численное определение второго члена (12) показывает, что его значение довольно точно равняется экспериментальному значению постоянной Ридберга.

Можно повторить то же самое вычисление, предполагая, что мы имеем уже дело с атомом, имеющим атомный номер  $N$ , ионизированным  $N-1$ -кратно. Следовательно, придется решать задачу, аналогичную предыдущей в отношении атома водорода, исключая только то, что центральный заряд теперь уже  $Ne$  вместо  $e$ <sup>1)</sup>. Повторяя тот же ход рассуждений, легко найти для спектрального терма вместо (10):

$$\frac{E_n}{h} = -\frac{2 \pi^2 m e^4}{n^2 h^3} N^2 = -\frac{R N^2}{n^2} \quad (13)$$

Спектральные термы представляют собой числа, кратные квадрату атомного номера. Наипростейший случай представляет атом гелия, ионизированный однократно, для которого имеем  $N=2$ . Спектральные термы и частоты учетверяются. Однако,

<sup>1)</sup> Часто говорят, что атом с номером  $N$ , ионизированный  $N-1$ -кратно, водородоподобен.

экспериментальные данные показывают, что постоянная Ридберга вовсе не имеет одинакового значения для  $H$  и  $He^+$ . Бор смог определить эту разницу, учитывая обратное действие электрона на ядро.

### 3. Квантованные энергии эллиптических орбит

Приведенные выше вычисления Бора не могут рассматриваться как исчерпывающие, ибо изучение движения электрона вокруг ядра в принципе является задачей с двумя переменными: радиусом-вектором и азимутом. Исключение изменений радиуса-вектора, ограничиваясь только круговыми траекториями, очевидно, искусственно. А чтобы целиком и полностью разрешить задачу, необходимо наперед уметь написать квантовые условия для движений с несколькими степенями свободы. Вот как это удалось сделать.

Пусть мы имеем систему с  $n$  степенями свободы, определяемую переменными  $q_1 \dots q_n$ . Если все переменные допускают тот же самый период  $T$ , то - есть если через интервалы времени, равные  $T$ , они принимают то же самое значение, система приобретает те же самые конфигурации: она периодична. Если каждая переменная  $q_i$  имеет период  $T_i$ , причем эти периоды несоизмеримы, то система является квази-периодической. Квантовые условия имеют смысл только для систем периодических или квази-периодических. Для систем такого рода, которые приходилось квантовать в прежней теории квантов, всегда представлялось возможным выбирать переменные так, что они образовывали систему „разделенных переменных“, иначе говоря, каждый из моментов Лагранжа  $p_i$  мог выражаться через функцию одной соответствующей координаты  $q_i$ . Выбравши таким образом переменные, Вильсон и Зоммерфельд показали, что квантование должно выражаться  $n$  условиями:

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (n_i \text{ целое}) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (14)$$

причем каждый интеграл берется для периода  $T_i$  переменной  $q_i$ .

Зоммерфельд воспользовался этим новым выражением, чтобы более полно разрешить проблему атома водорода, принимая во внимание все эллиптические движения. Пусть  $r$  будет радиус-вектор и  $\theta$  азимут электрона на его кеплеровой траектории. Тогда кинетическая энергия  $T$  будет:

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) \quad (15)$$

и моменты Лагранжа будут, по определению:

$$p_r = \frac{\partial T}{\partial \dot{r}} = m \dot{r} \quad p_\theta = \frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}} = m r^2 \dot{\theta} \quad (16)$$

Здесь могут быть применены условия (14), которые примут вид:

$$\int_0^{2\pi} m r^2 \dot{\theta} d\theta = n_1 h \quad \oint m \dot{r} dr = n_2 h \quad (17)$$

$m r^2 \dot{\theta}$  является постоянным моментом вращения в центральном поле, по теореме площадей. Следовательно, первое условие (17) дает:

$$m r^2 \dot{\theta} = n_1 \frac{h}{2\pi} \quad (18)$$

и совпадает с условием (7) Бора для круговых орбит.

Чтобы вычислить второй интеграл (17), мы должны написать выражение энергии так:

$$E = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2m} \left[ \frac{(m r^2 \dot{\theta})^2}{r^2} + m^2 \dot{r}^2 \right] - \frac{e^2}{r} \quad (19)$$

откуда, принимая во внимание (18), получим:

$$m \dot{r} = p_r = \pm \sqrt{2m \left( E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{n_1^2 h^2}{4\pi^2 r^2}} \quad (20)$$

формулу, которая показывает разделение переменных.

Во время движения радиус-вектор  $r$  колеблется между значениями  $r_1$  и  $r_2$ , которые обращают корень (20) в нуль, так как  $p_r$  должно быть действительным; предполагая  $r_1 < r_2$ , напишем:

$$\oint p_r dr = 2 \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left( E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{n_1^2 h^2}{4\pi^2 r^2}} dr \quad (21)$$

ибо в формуле (20) необходимо брать знак  $+$ , когда  $r$  возрастает, и знак  $-$ , когда он убывает. Зоммерфельд вычислил интеграл (21) при помощи теории вычетов Коши и нашел для него значение  $-|n_1| h + \frac{2\pi m e^2}{\sqrt{2m|E|}}$ . Приравнивая к  $n_2 h$ , легко найти:

$$E_{n_1, n_2} = - \frac{2\pi^2 m e^4}{(|n_1| + n_2)^2 h^2} \quad (22)$$

Эта формула дает квантованную энергию стационарного состояния, соответствующего квантовым числам  $n_1$  и  $n_2$ . Так как  $|n_1|$  и  $n_2$  являются числами целыми положительными или нулями, которые не могут быть одновременно равными нулю, как в этом легко убедиться, можно положить:

$$|n_1| + n_2 = n \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (23)$$

и тогда формула (22) дает те же самые уровни энергии, что и первоначальная теория Бора. Иначе говоря, рассмотрение эллип-



тических орбит не приводит ни к какому новому выражению для спектральных термов. Введение двух степеней свободы не может само по себе объяснить тонкую структуру серии Бальмера.

#### 4. Теория тонкой структуры Зоммерфельда

Чтобы объяснить тонкую структуру спектра водорода, Зоммерфельд применял вместо классической механики механику релятивистскую. Эта мысль целиком оправдывается, если заметим, что в атоме Бора скорость электронов на внутренних орбитах должна быть сравнима со скоростью света.

В релятивистской механике для кинетической энергии электрона имеется выражение:

$$T = m_0 c^2 \left[ \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right] \quad (24)$$

где  $m_0$  — масса электрона в состоянии покоя, а  $\beta$  имеет обычное значение:

$$\beta = \frac{v}{c} = \frac{1}{c} \sqrt{\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2} \quad (25)$$

Но здесь уже нельзя больше определять момент  $p_i$ , сопряженный с переменной  $q_i$ , как производную от  $T$  по  $\dot{q}_i$ ; здесь необходимо ввести релятивистскую функцию Лагранжа:

$$L = -m_0 c^2 \sqrt{1-\beta^2} - U \quad (26)$$

где  $U$  представляет потенциальную энергию, и тогда:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (27)$$

В случае водородного атома потенциальная энергия не зависит от  $q_i$ , и поэтому имеем

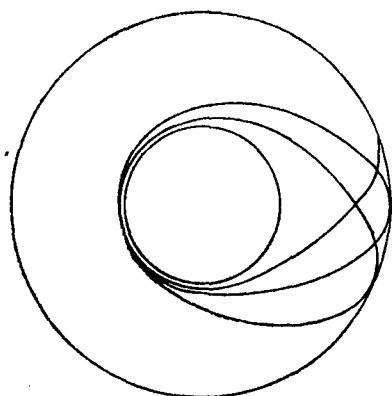
$$\begin{aligned} p_r &= \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \frac{m_0 c^2}{2\sqrt{1-\beta^2}} \cdot \frac{\partial \beta^2}{\partial \dot{r}} = \frac{m_0 r}{\sqrt{1-\beta^2}} \\ p_\theta &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \frac{m_0 c^2}{2\sqrt{1-\beta^2}} \cdot \frac{\partial \beta^2}{\partial \dot{\theta}} = \frac{m_0 r^2 \dot{\theta}}{\sqrt{1-\beta^2}} \end{aligned} \quad (28)$$

Следовательно, квантовые условия (14) здесь представляются:

$$\int_0^{2\pi} \frac{m_0 r^2 \dot{\theta}}{\sqrt{1-\beta^2}} d\theta = n_1 h; \quad \oint \frac{m_0 \dot{r}}{\sqrt{1-\beta^2}} dr = n_2 h \quad (29)$$

Подробное изучение траектории, в которое мы здесь вдаваться не будем, показывает, что электрон описывает эллипс с вращающимся перигелием. Иначе говоря, траектория в каждый данный момент является касательной к эллипсу, который

медленно вращается в своей плоскости. Радиус-вектор колеблется между значениями  $r_1$  и  $r_2$ , но время, которое он тратит на описание круга  $r_1 \rightarrow r_2 \rightarrow r_1$  (период переменной  $r$ ), несколько больше, чем время, затрачиваемое азимутом для возрастания до  $2\pi$  (период переменной  $\theta$ ). Таким образом, орбита целиком не замыкается и движение является квази-периодическим.



Фиг. 1

Момент  $p_\theta$  является, кроме того, моментом вращения вокруг центра, и легко показать, что он здесь является константой, то-есть, что теорема площадей всегда действительна. Следовательно, первое условие (29) дает:

$$p_\theta = \frac{m_0 r^2 \dot{\theta}}{\sqrt{1-\beta^2}} = n_1 \frac{h}{2\pi} \quad (30)$$

Полная энергия представляет собой сумму энергии внутренней  $m_0 c^2$ , энергии кинетической и энергии потенциальной. Следовательно, она равна:

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{e^2}{r} \quad (31)$$

Принимая во внимание (28) и (25), эту формулу легко привести к виду:

$$W = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}} - \frac{e^2}{r} \quad (32)$$

Назовем через  $E$  энергию  $W$ , уменьшенную на выражение  $m_0 c^2$ ; тогда  $E$  будет обозначать энергию, как ее определяют в классической механике. В формуле (32) заменим  $W$  выражением  $E + m_0 c^2$  и решим относительно  $p_r$ . Получим:

$$p_r = \pm \sqrt{A + 2\frac{B}{r} + \frac{C}{r^2}} \quad (33)$$

при значениях:

$$\begin{aligned} A &= \frac{E^2}{c^2} + 2 m_0 E = m_0^2 c^2 \left[ \left( 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right)^2 - 1 \right] \\ B &= \frac{E e^2}{c^2} + m_0 e^2 E \\ C &= \frac{e^4}{c^2} - p_\theta^2 = \frac{e^4}{c^2} - \frac{n_1^2 h^2}{4 \pi^2} \end{aligned} \quad (34)$$

Зоммерфельд далее ввел в вычисление то, что теперь называют „константой тонкой структуры“:

$$\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc} \quad (35)$$

Таким образом, можно написать:

$$C = -\frac{n_1^2 h^2}{4\pi^2} \left[ 1 - \frac{\alpha^2}{n_1^2} \right] \quad (36)$$

Применение теоремы вычетов позволяет установить, что

$$\oint \sqrt{A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}} dr = -2\pi i \left( \sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right) \quad (37)$$

Приравнивая второй член (37)  $n_2 h$  сообразно (29) и заменяя А, В и С их значениями, путем простых преобразований Зоммерфельд находит

$$1 + \frac{E}{m_0 c^2} = \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{[n_2 + \sqrt{n_1^2 - \alpha^2}]^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (38)$$

формулу, которая в точности дает энергию  $E$  стационарного состояния, определяемого квантовыми числами  $n_1$  и  $n_2$ .

Так как величина  $\alpha^2$  очень мала, первое приближение заключается в пренебрежении членами степени выше первой по  $\alpha^2$ . Тогда, как и следовало ожидать, мы возвращаемся к формуле (22) нерелятивистской теории и не находим тонкой структуры. Лучшее приближение будет, если сохранить члены, пропорциональные  $\alpha^4$ , и написать

$$\begin{aligned} & \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{[n_2 + \sqrt{n_1^2 - \alpha^2}]^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \\ &= 1 - \frac{\alpha^2}{2(|n_1| + n_2)^2} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^4}{(|n_1| + n_2)^4} \left( \frac{1}{4} + \frac{n_2}{|n_1|} \right) \end{aligned} \quad (39)$$

Перенося это значение в формулу (38), находим:

$$E = -\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{(|n_1| + n_2)^2 h^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{(|n_1| + n_2)^2} \left( \frac{1}{4} + \frac{n_2}{|n_1|} \right) \right] \quad (40)$$

Третий член в скобках объясняет существование тонкой структуры серии Бальмера, так как он зависит отдельно и от  $|n_1|$  и от  $n_2$ , а не только от  $|n_1| + n_2$ .

Теперь мы несколько изменим обозначения. Число  $n = |n_1| + n_2$  мы назовем „главным квантовым числом“, а число  $k = |n_1| - n_2$  „азимутальным квантовым числом“. Очевидно, что каждый уровень квантованной энергии вместо чисел  $n_1$  и  $n_2$  можно характеризовать числами  $n$  и  $k$ . Формула (40) теперь примет вид (вводя постоянную Ритберга):

$$E_{nk} = -\frac{R h}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (41)$$

В прежней теории квантов считалось, что азимутальное число  $k$  никогда не может принять значения 0; для круговых траекторий имели  $n_2 = 0$  или  $n = k$ , а для траекторий эллиптических  $0 < k < n$ . По формуле (41), каждая стационарная орбита характеризуется энергией  $E_{nk}$ , которая зависит не только от  $n$ , но также и от  $k$ . Но так как  $\alpha^2$  величина очень малая по сравнению с единицей, то различные спектральные термы, соответствующие одному и тому же значению  $n$ , — очень близки друг к другу, и, таким образом, получаем тонкую структуру линий, предвиденных теорией Бора.

Ясно, что спектральный терм Бора, соответствующий данному значению  $n$ , разлагается на  $n$  соседних термов, так как при определенном  $n$  для  $k$  может быть  $n$  значений  $1, 2 \dots n$ . Нужно отметить, что расстояние между соседними термами тем меньше, чем больше  $n$  благодаря наличию  $n_2$  в знаменателе члена с  $\alpha^2$ .

Рассмотрим серию Бальмера. В первом приближении частоты линий даются формулой:

$$\nu = R \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad n = 3, 4 \dots \quad (42)$$

Во втором приближении, по Зоммерфельду, необходимо спектральный терм  $\frac{R}{2^2}$  заменить на  $\frac{R}{2^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{2^2} \left( \frac{2}{k} - \frac{3}{4} \right) \right]$ ; а также спектральный терм  $\frac{R}{n^2}$  на  $\frac{R}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right]$ .

Следовательно, в серии Бальмера имеется тонкая структура с постоянным расстоянием между линиями, происходящим вследствие раздвоения ( $k = 1, 2$ ) первого спектрального терма, и вторая тонкая структура с расстоянием между линиями, убывающим в направлении вверх в пределах серии, зависящая от сложности второго переменного спектрального терма. Эта вторая тонкая структура практически ненаблюдаема, так как она слишком тонка. Первая соответствует разложению каждой из линий, предусмотренных формулой Бальмера, на дублет с постоянным расстоянием между составляющими для всей серии, которое равняется:

$$\Delta \nu_H = \frac{R}{2^2} \left[ 1 + \frac{\alpha}{2^2} \left( \frac{2}{1} - \frac{3}{4} \right) \right] - \frac{R}{2^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{2^2} \left( \frac{2}{2} - \frac{3}{4} \right) \right] = \frac{R\alpha^2}{16} \quad (43)$$

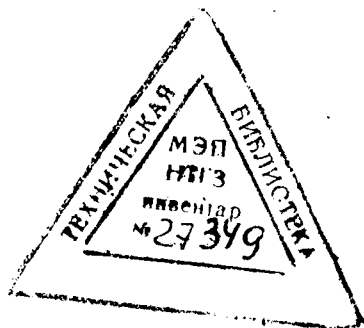
При замене частот волновыми числами числовое значение  $\frac{R\alpha^2}{16}$  дает  $0,365 \text{ см}^{-1}$ . Эта величина с достаточной точностью сходится с числом, найденным экспериментальным путем. Таким образом, дополняя теорию Бора введением теории относительности, находим объяснение существованию дублетов в серии Бальмера.

Если мы вернемся к вычислениям Зоммерфельда, предполагая, что мы имеем дело не с атомом водорода, а с атомом с атомным числом  $N$ , ионизированным  $N-1$ -кратно, мы найдем для энергии стационарного состояния, характеризуемого числами  $n$  и  $k$ :

$$E_{nk} = - \frac{R N^2 h}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 N^2}{n^2} \left( \frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (44)$$

Следовательно, поправка теории относительности помножится на  $N^2$ , а расстояние между компонентами дублета на  $N^4$ . Таким образом, для ионизированного гелия ( $N=2$ ) расстояние между компонентами дублетов в серии, соответствующей серии Бальмера, должно быть в 16 раз больше, нежели в самой серии Бальмера. Отсюда ясно, что изучение дублетов в спектре  $He^+$  могло послужить для проверки теории Зоммерфельда. Такая проверка, произведенная Пашеном, дала положительный ответ.

Таким образом, теория тонкой структуры Зоммерфельда для  $H$  и  $He^+$  дала очень хорошие результаты. Она оказалась с успехом применимой для объяснения важного класса дублетов в спектре X-лучей. Но позднее выяснилось, что для X-лучей и даже для простого спектра водорода применение формулы (41) наталкивается на большие трудности. Подробнее мы остановимся на этом в главе III.



## Общие понятия о дублетных оптических спектрах и их интерпретация

### 1. Формула Ридберга и спектральные серии

Успех формулы Бальмера и формул того же типа для водорода долго заставлял спектроскопистов биться над вопросом, нельзя ли отыскать аналогичные формулы и для прочих элементов. Так как принцип комбинирования справедлив для всех оптических линий, оставалось лишь отыскать для спектральных термов любого элемента выражение, обобщающее выражение  $\frac{R}{n^2}$ , найденное для водорода.

Ридберг показал, что в первом приближении спектральные термы элемента могут быть написаны в таком виде:

$$\frac{R}{(n + \Delta)^2} \quad (1)$$

где  $R$  — та же постоянная, что и для водорода. В выражении (1) число  $n$  есть число целое положительное, а  $\Delta$  является числом дробным, могущим принимать для каждого элемента несколько различных значений. Формула Ридберга не дает очень точного выражения спектральных термов. Ритц предложил более точное выражение, где точно также фигурируют целое число  $n$  и количество  $\Delta$ . Не останавливаясь здесь на более точном выражении спектральных термов, как функций  $n$  и  $\Delta$ , мы примем, что каждый спектральный терм может быть выражен при помощи этих двух количеств, а следовательно, и обозначен через  $(n, \Delta)$ . При данном значении  $n$ ,  $\Delta$  вообще может принимать несколько различных значений. Следовательно, тому же самому  $n$  может соответствовать несколько спектральных термов. Спектроскописты обычно обозначают возможные значения  $\Delta$  при помощи ряда букв:  $s, p, d, f, g, h \dots$  и, составив таблицу спектральных термов, придают ей следующий вид:

(1, s)	(2, s)	(3, s)	(4, s)	(5, s) . . . . .	
	(2, p)	(3, p)	(4, p)	(5, p) . . . . .	
		(3, d)	(4, d)	(5, d) . . . . .	(2)
			(4, f)	(5, f) . . . . .	
				(5, g) . . . . .	

Таким образом, для  $n=1$   $\Delta$  имеет одно значение  $s$ . Для  $n=2$   $\Delta$  может иметь значения  $s$  или  $p$ . Для  $n=3$   $\Delta$  имеет одно

из значений  $s, p, d$  и т. д. В общем, когда  $n$  возрастает на единицу, то и число возможных значений  $\Delta$  точно также возрастает на единицу.

Как и для водорода, частоты линий одной и той же спектральной серии всегда представляют собой разность между характеристическим постоянным термом серии и переменным термом. Вот формулы частот 4 серий, наблюдаемых во всех спектрах и особенно хорошо изученных спектроскопистами:

Главная серия	$\nu_n = (1, s) - (n, p) \quad n = 2, 3 \dots$	
Диффузная серия или I серия второго порядка	$\nu_n = (2, p) - (n, d) \quad n = 3, 4 \dots$	
Узкая серия или 2 серия второго порядка	$\nu_n = (2, p) - (n, s) \quad n = 3, 4 \dots$	(3)
Серия Бергманна или основная серия	$\nu_n = (3, d) - (n, f) \quad n = 4, 5 \dots$	

Так как значение спектральных термов всегда уменьшается по мере возрастания  $n$ , идя вверх по спектральной серии, мы находим линии, частота которых все более и более приближается к постоянному спектральному терму, который характеризует данную серию. Поэтому этот спектральный терм может быть назван „пределом серии“.

Из формул серий (2) замечается особенность, наблюдаемая во всех сериях, получающихся в обычных условиях: если возможные значения  $\Delta$  расположить в порядке  $s, p, d, f, g$  и т. д., то значения  $\Delta$ , фигурирующие в формуле серии, всегда располагаются в правильном порядке. Если значения  $\Delta$  вместо букв  $s, p, d \dots$  обозначить цифрами  $1, 2, 3 \dots$ , можно сказать: „При переходе от одного терма до другого в формуле серии  $\Delta$  увеличивается или уменьшается на единицу“. Это называется „правилом отбора“, которое показывает, что громадное число комбинаций между спектральными термами, по крайней мере в обычных условиях лучеиспускания, не соответствует фактически наблюдаемым линиям.

## 2. Дублетный спектр щелочных металлов

Таблица (2) спектральных термов является только лишь первым приближением; к сожалению, действительность далеко не так проста. Прогресс спектроскопии показал, что линии, которые в только что изложенной схеме Ридберг-Ритца считались простыми, в действительности образованы группой смежных линий, состоящих из дублетов или триплетов или вообще из мультиплетов. Так как мы не можем здесь останавливаться на подробном изложении этого действительно сложного вопроса,

мы ограничимся исследованием спектра щелочных металлов, в котором линии являются дублетами.

Изучение спектра щелочных металлов показало, что для этих элементов большая часть спектральных термов схемы Ридберг - Ритца раздваивается. Точнее выражаясь, значение  $s$  количества  $\Delta$  всегда остается одно и то же, а значения  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ,  $g \dots$  все двойные: имеется два очень близких значения  $p_1$  и  $p_2$ , два очень близких значения  $d_1$  и  $d_2$  и т. д. Следовательно, имеется полное основание заменить таблицу (2) следующей таблицей:

(1, $s$ )	(2, $s$ )	(3, $s$ )	(4, $s$ )	(5, $s$ ) . . . . .	
	(2, $p_1$ )	(3, $p_1$ )	(4, $p_1$ )	(5, $p_1$ ) . . . . .	
	(2, $p_2$ )	(3, $p_2$ )	(4, $p_2$ )	(5, $p_2$ ) . . . . .	
		(3, $d_1$ )	(4, $d_1$ )	(5, $d_1$ ) . . . . .	
		(3, $d_2$ )	(4, $d_2$ )	(5, $d_2$ ) . . . . .	
			(4, $f_1$ )	(5, $f_1$ ) . . . . .	
			(4, $f_2$ )	(5, $f_2$ ) . . . . .	
				(5, $g_1$ ) . . . . .	
				(5, $g_2$ ) . . . . .	(4)

Обычные спектральные серии получаются в результате комбинирования спектральных термов, причем  $\Delta$  принимает два смежных значения в порядке:  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ,  $g \dots$  Это уже упоминавшееся выше правило отбора. Но здесь мы обнаруживаем другое дополнение. Например, возьмем диффузную серию формулы

$$\nu = (2, p) - (n, d) \quad (5)$$

и рассмотрим линии этой серии, для которых  $n = 3$ . А priori эта группа линий может включать в себе 4 следующих линии:

$$\begin{aligned} &(2, p_1) - (3, d_1); \quad (2, p_1) - (3, d_2); \\ &(2, p_2) - (3, d_1); \quad (2, p_2) - (3, d_2) \end{aligned} \quad (6)$$

Однако, опыт показывает, что вторая из этих линий в обычных условиях никогда не наблюдается. В этом заключается новое правило отбора, точную формулировку которого мы дадим после введения обозначения квантовых чисел в определение спектральных термов таблицы (4).

### 3. Объяснение схемы Ридберг - Ритца при помощи теории Бора

Ввиду того, что теория Бора дала прекрасные результаты для водорода и ионизированного гелия, вполне естественным было стремление распространить ее на атомы более сложные, и понятно, что первой задачей в этом направлении было объяснение таблицы (2) спектральных термов Ридберг - Ритца.

Когда теорию Бора стремились распространить на атомы, содержащие более одного планетарного электрона, пришлось натолкнуться на значительные трудности. Динамическая проблема усложнилась, применение квантовых правил стало неопре-



деленным. Тем не менее, общая аналогия спектров всех элементов и наличие у них всех постоянной  $R$  Ридберга привело к мысли, что планетарная схема, такая полезная при изучении атома водорода, должна оказаться применимой, во всяком случае до некоторой степени, и для всех прочих элементов. Чтобы этого добиться, начали с применения очень грубой гипотезы: в атоме с атомным числом  $N$  допускается наличие  $N - 1$  планетарных электронов, вращающихся вблизи ядра и образующих вокруг него „электронный каркас“, в то время как  $N$ -тый планетарный электрон, называемый „оптическим электроном“, имеет орбиту вне электронного каркаса. Переходы оптического электрона из одного стационарного состояния в другое и определяют оптический спектр элемента. Благодаря гипотезе электронного каркаса явилась возможность принять приближенно, что действие ядра с зарядом  $+Ne$  и каркаса с зарядом  $-(N - 1)e$  на оптический электрон эквивалентно действию центрального заряда  $+e$ . Это привело к проблеме атома водорода с одним квантовым числом. Во втором приближении Зоммерфельд пытался учесть то, что заряд ядра и заряд каркаса не компенсируются именно до единицы. Траектория электрона при этом оказывается незамкнутой, приходится ввести второе квантовое число  $k$ , и это дало возможность уяснить переход термов, имеющих форму Бальмера, к термам формы  $(n, \Delta)$ . Зоммерфельд вычислил, правда, довольно грубо, термы  $(n, \Delta)$ , получаемые этим способом, и снова пришел к формулам Ридберг-Ритца. Теория Зоммерфельда и другие более тщательно разработанные, которые можно найти в старых трудах по квантовой теории<sup>1)</sup>, помогли найти соответствие различных значений  $\Delta (s, p, d, \dots)$  со значениями квантового азимутального числа  $k$  Зоммерфельда в следующем виде:

$$\begin{array}{cccccccc} k = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & \dots \\ \Delta = & s & p & d & f & g & h & \dots \end{array} \quad (7)$$

Это дает нам возможность написать весь спектральный терм  $(n, \Delta)$  в форме  $(n, k)$ : например, терм  $(2, p)$  пишется  $(2, 2)$ .

Так как азимутальное число  $k$  всегда меньше или равнополному числу  $n$  и не может принять значения 0, в этом находят объяснение, почему для  $n = 1$  количество  $\Delta$  может иметь только значение  $s$ , для  $n = 2$  оно может иметь только значение  $s$  и  $p$  и т. д. Особенности таблицы (2), таким образом, оказались вполне объяснимыми.

Исходя из рассуждений, основанных на принципе соответствия Бора, старой квантовой теории удалось показать, что единственными переходами, которые могут иметь место, являются переходы, для которых  $\delta k = \pm 1$ . В этом заключается „правило отбора“, о котором мы уже упоминали в связи с таб-

<sup>1)</sup> См. в особенности Léon Brillouin: *L'atome de Bohr*, Paris, Presses universitaires (1931), гл. XII.

лицей (2), так как увеличение или уменьшение на единицу для  $k$  согласно (7) соответствует смещению в серии возможных значений  $\Delta$ .

#### 4. Дублетные спектры и квантовое число $j$

Итак, благодаря теориям Бора и Зоммерфельда, вводя два квантовые числа  $n$  и  $k$ , удалось объяснить спектральные термы (2) схемы Ридберг-Ритца; но мы уже видели, что эта таблица недостаточна, так как спектральные термы, фигурирующие в ней как простые, в действительности оказываются сложными. Вполне естественно предположить, что для характеристики каждого сложного спектрального терма, соответствующего такому же терму таблицы (2), нужно ввести третье квантовое число. Это и сделано еще во времена старой квантовой теории, вводя исключительно эмпирическим путем наряду с числами  $n$  и  $k$  третье число  $j$ . Тогда же Зоммерфельд дал ему название „внутреннего квантового числа“, которое теперь уже представляется не обоснованным.

Не входя здесь в объяснение того, как введение квантового числа  $j$  позволило классифицировать сложные оптические мультиплеты, мы ограничимся изучением с этой точки зрения дублетных спектров щелочных металлов. В этом случае, как мы это уже видели, каждый спектральный терм ( $n, \Delta$ ) вообще дублетный. Согласно идей, изложенных в предыдущем параграфе, это значит, что одному и тому же значению числа  $k$  для  $\Delta$  вместо одного значения соответствуют два очень близких значения. Эти два близкие значения  $\Delta$ , соответствующие определенному значению  $n$  и  $k$ , должны характеризоваться различными значениями квантового числа  $j$ . Это, в конце концов, привело к тому, что двум соседним спектральным термам приписывается два значения  $j$ :

$$j = k - 1 \pm \frac{1}{2} = l \pm \frac{1}{2} \quad (8)$$

вводя обозначение:

$$k - 1 = l \quad (9)$$

в полезности которого мы убедимся позже. Кроме того, предположим, что число  $j$  не может принимать отрицательных значений, вследствие чего для  $k = 1$  значение  $j$  составляет только  $j = \frac{1}{2}$ . Так нашли объяснение единичности термов  $s$  в таблице (4).

Формула (8) непосредственно приводит к следующей таблице соответствия между квантовыми числами  $k$  и  $j$  и значениями  $\Delta$ .

$k$	1	2	3	4	5	...
$l$	0	1	2	3	4	...
$j$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$ $\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$ $\frac{7}{2}$	$\frac{7}{2}$ $\frac{9}{2}$	...
$\Delta$	$s$	$p_1$ $p_2$	$d_1$ $d_2$	$f_1$ $f_2$	$g_1$ $g_2$	...

(10)

Следовательно, теперь мы можем каждый спектральный терм таблицы (4) представить при помощи символа  $(n, k, j)$  и вместо таблицы (4) получим следующую:

$$\begin{array}{cccccccc}
 (1, 1, \frac{1}{2}) & (2, 1, \frac{1}{2}) & (3, 1, \frac{1}{2}) & (4, 1, \frac{1}{2}) & (5, 1, \frac{1}{2}) & \dots & & \\
 & (2, 2, \frac{1}{2}) & (3, 2, \frac{1}{2}) & (4, 2, \frac{1}{2}) & (5, 2, \frac{1}{2}) & \dots & & \\
 & (2, 2, \frac{3}{2}) & (3, 2, \frac{3}{2}) & (4, 2, \frac{3}{2}) & (5, 2, \frac{3}{2}) & \dots & & \\
 & & (3, 3, \frac{3}{2}) & (4, 3, \frac{3}{2}) & (5, 3, \frac{3}{2}) & \dots & & \\
 & & (3, 3, \frac{5}{2}) & (4, 3, \frac{5}{2}) & (5, 3, \frac{5}{2}) & \dots & & (11) \\
 & & & (4, 4, \frac{5}{2}) & (5, 4, \frac{5}{2}) & \dots & & \\
 & & & (4, 4, \frac{7}{2}) & (5, 4, \frac{7}{2}) & \dots & & \\
 & & & & (5, 5, \frac{7}{2}) & \dots & & \\
 & & & & (5, 5, \frac{9}{2}) & \dots & & 
 \end{array}$$

Мы уже отметили, что для спектральных термов щелочных металлов, кроме правила отбора, действительного для таблицы (2) (то-есть  $\delta k = \pm 1$ ), существует другое правило того же типа, так как, например, вторая из четырех линий (6) в обычных условиях не наблюдается. Это новое правило выражается при

помощи числа  $j$  формулой  $\delta j = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$ .

Таким образом, мы в общем имеем два следующих правила:

$$\delta k = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \quad \delta j = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad (12)$$

Проверим эти правила на четырех линиях  $(2p - 3d)$ , даваемых в (6). Выраженные при помощи наших нынешних обозначений, они изобразятся:

$$\begin{array}{l}
 (2, 2, \frac{3}{2}) - (3, 3, \frac{5}{2}) \quad (2, 2, \frac{1}{2}) - (3, 3, \frac{5}{2}); \\
 (2, 2, \frac{3}{2}) - (3, 3, \frac{3}{2}) \quad (2, 2, \frac{1}{2}) - (3, 3, \frac{3}{2}).
 \end{array} \quad (13)$$

Для всех четырех  $\delta k = +1$ , но одна из них  $(2, 2, \frac{1}{2}) - (3, 3, \frac{5}{2})$  не удовлетворяет второму правилу (12). Это как раз именно та, которая экспериментально не наблюдается.

В прежней квантовой теории смысл числа  $j$  оставался неизвестным, и все попытки объяснить его оказались тщетными. Гипотеза магнитного вращающегося электрона Уленбека и Гаудсмита открыла его действительное значение, и, мы увидим, оно совершенно естественно появляется в теории Дирака.

## Глава III

# Спектры X-лучей и теории Бора и Зоммерфельда

### 1. Закон Мозели и теория Бора

В общем спектры X-лучей имеют те же общие черты, что и оптические спектры. К ним применим принцип комбинирования; в них встречаются серии, соответствующие комбинации постоянного спектрального термина с переменным спектральным термом; в них наблюдаются и правила отбора.

В первом приближении спектральные термы X-лучей можно представить выражением:

$$R \frac{N^2}{n^2} \quad n = 1, 2 \dots \quad (1)$$

где  $R$  — постоянная Ридберга и  $N$  — атомный номер излучающего тела. Это и есть закон Мозели. Кроме того, наличие здесь постоянной Ридберга указывает на близкое родство рентгеновских спектров с оптическими.

В действительности форма (1) спектральных термов является только первым приближением, а настоящие спектральные термы X-лучей точно также представляют такую степень сложности, как и оптические спектральные термы щелочных металлов. Встречающиеся здесь дублеты кажутся вполне объяснимыми теорией тонкой структуры Зоммерфельда, но более внимательное изучение показало, что эта теория недостаточна, и только теория магнитного электрона, особенно в форме, предложенной Дираком, в конце концов, привела все в ясность.

По прежним простым представлениям теории Бора, испускание X-лучей связано с реорганизацией электронного каркаса. Бор, как это мы видели в последней главе, считал, что испускание светящихся лучей происходит в результате переходов внешнего электрона с одной устойчивой орбиты на другую, причем совокупность внутренних электронов вследствие переплетения их орбит образует некоторого рода каркас. Следовательно, и испускание X-лучей будет соответствовать изменениям, которым может подвергнуться эта внутренняя система при переходе из одного устойчивого состояния в другое. Естественно, что точное вычисление этих устойчивых состояний даже в прежней квантовой теории является запутанным.

В настоящее время удалось произвести лишь приближенное

вычисление, в конце концов, очень грубое, следующим образом. Предполагается, что электронные орбиты каркаса, каждая в отдельности, характеризуются одним или несколькими квантовыми числами, что приводит в некотором смысле к пренебрежению взаимодействием электронов, так как их приходится рассматривать отдельно. Тогда говорят, что электроны, обладающие одинаковыми или почти одинаковыми энергиями, образуют „оболочку“; кроме того, оболочка может включать орбиты различных типов, характеризующиеся различными совокупностями квантовых чисел, но энергии этих орбит должны быть очень близкими.

Вычисления, произведенные для водорода, показывают нам, что орбиты одной и той же оболочки должны характеризоваться одним и тем же главным квантовым числом  $n$ . Опытным путем в атомах открыто существование оболочек, которые принято обозначать последовательно буквами алфавита K, L, M и т. д. Мы представляем себе, что для оболочки K  $n=1$ , для оболочки L  $n=2$  и т. д.

Орбиты оболочки K имеют наименьшую энергию. Согласно хорошо известному принципу казалось бы, что в нормальном состоянии все электроны атома должны находиться в оболочке K. Изучение спектров X-лучей и периодичности химических свойств в таблице Менделеева показывает, что дело обстоит не так. Мы должны предположить некоторого рода „насыщение оболочек“, т. е. допустить, что в каждой оболочке существует максимальное число электронов. Критическое изучение сведений, которые дает по этому поводу опыт, позволяют формулировать следующее правило:

„Максимальное число электронов, которые могут принадлежать оболочке, определяемой ее главным квантовым числом  $n$ , равно  $2n^2$ “.

Далее мы увидим, как можно уточнить распределение электронов между уровнями энергии, принадлежащими одной и той же оболочке.

Вспомним теперь, как представляли себе испускание X-лучей Бор и Коссель. Внешний агент (материальная ударяющая частица или радиация), действуя на атом в нормальном состоянии, может вырвать и выбросить наружу один из электронов каркаса. Тогда атом остается в аномальном состоянии; он подвергается „внутренней ионизации“. Пусть далее  $W_0$  будет нормальная минимальная энергия атома, а  $W_1$ —его энергия после внутренней ионизации.

Разницу  $W_1 - W_0$  дает ионизирующий агент. Мы увидим, что она соответствует (с точностью до множителя  $\frac{1}{h}$ ) предельной частоте спектральной серии X. Следовательно, атом имеет свободное место в своем каркасе и реорганизация последнего может произойти самопроизвольно, так как электрон

сможет покинуть место, которое он занимал вначале, и занять свободное место. Естественно, это превращение может произойти только в том случае, если оно соответствует уменьшению полной энергии атома, и должно сопровождаться излучением, которое относится к области X.

Короче говоря, происхождение X-лучей, согласно этой концепции, представляет собой переход электрона из определенной оболочки в другую с меньшей энергией, где ионизация предварительно создала пустое место.

После реорганизации каркаса атом находится в состоянии менее глубокой ионизации и обладает энергией  $W_2$ , промежуточной между  $W_0$  и  $W_1$ .

Рассмотрим это второе ионизированное состояние и вспомним, что все электроны считаются одинаковыми: это новое состояние будет идентичным тому, которое создалось бы внешним агентом, если бы вместо того, чтобы вытолкнуть первый электрон, он вытолкнул бы второй, тот самый, который переместился во время реорганизации. Тогда энергия  $W_2 - W_0$  представляет работу, соответствующую менее глубокой ионизации.

Следовательно, правило Бора приводит к тому, что излучению X, испускаемому во время реорганизации, приписывается частота:

$$\nu = \frac{1}{h} (W_1 - W_2) = \frac{1}{h} [(W_1 - W_0) - (W_2 - W_0)] \quad (2)$$

Составим список энергий  $W_1 \dots$  атома в его различных состояниях внутренней ионизации, вычитая из каждой энергию  $W_0$  нормального состояния. Мы получим то, что можно назвать уровнями энергии атома, относительно нормального состояния. Деля на  $h$ , получим спектральные термы X:

$$\frac{W_1 - W_0}{h} \quad \frac{W_2 - W_0}{h} \quad \dots \quad \frac{W_n - W_0}{h} \quad \dots \quad (3)$$

Следовательно, спектральные термы X равны работам ионизации, разделенным на  $h$ . Частоты X линий имеют форму:

$$\nu = \left| \frac{W_n - W_0}{h} - \frac{W_m - W_0}{h} \right| \quad (4)$$

Линии одной и той же серии соответствуют одной и той же  $W_n$ , то-есть одному и тому же конечному уровню. Второй терм в (4) различен для разных линий той же самой серии и для линий восходящего порядка стремится к нулю: частота линий, когда они имеют восходящий порядок в серии, стремится к пре-

желу, равному спектральному терму  $\frac{W_n - W_0}{h}$ , который характеризует серию.

Закон Мозели учит нас, что в последовательности элементов каждый из спектральных термов (3) изменяется, в первом и достаточно грубом приближении, пропорционально квадрату атомного номера. Чтобы найти этот закон с помощью теории Бора, принимают, что электрон каркаса может рассматриваться как находящийся в центральном поле, равном  $(N - z) \frac{e}{r^2}$ , при-

чем член  $\frac{ze}{r^2}$  очень грубо представляет отталкивающее действие

электронов, наиболее приближенных к ядру. Таким образом приходим еще раз к водородоподобному случаю и, полагая  $N' = N - z$ , получаем для спектральных термов общую форму:

$$R \frac{N'^2}{n^2} \quad (5)$$

Для глубоких оболочек тяжелых атомов  $z$  — мало, и можно заменить  $N$  на  $N'$ . Мы приходим, таким образом, к форме (1) закона Мозели. Вполне очевидно, что вычисление неособенно точно: теория Бора скорее показывает, чем доказывает закон Мозели.

## 2. Общий анализ X-спектров

Первое, что поразило спектроскопистов в области рентгеновских спектров, это то, что X-линии довольно определенно разделяются на группы, изолированные друг от друга в виде лестницы частот или длин волны. Сначала считали, что каждая из этих групп линий образует одну серию, и обозначали эти серии последовательно буквами алфавита, начиная с буквы K: серия K, серия L, серия M и т. д. При переходе от одного элемента к другому, более тяжелому, совокупность серий смещается в направлении больших частот и приблизительно, как квадрат атомного номера  $N$  (Мозели). Более внимательное изучение затем показало, что группы линий, называвшиеся сначала серией L, серией M и т. д., в действительности распадаются на подгруппы, образующие настоящие серии, линии которых, впрочем, путаются на спектрограммах. Таким образом, существует несколько уровней L, несколько уровней M и т. д. с несколько различающейся энергией. Только уровень K — одиночный.

Опытные данные показывают, что существует 3 уровня L, 5 уровней M, 7 уровней N... Каждому из этих уровней соответствует определенный спектральный терм. Уровни и спектральные термы различают по присвоенным им римским цифрам—

меньшие цифры соответствуют более глубоким уровням, т. е. большим работам ионизации.

Вот для примера таблица X - линий серий K L M для тяжелых элементов:

Термы	Серия K				Серии L				
	K	L <sub>I</sub>	L <sub>II</sub>	L <sub>III</sub>	M <sub>I</sub>	M <sub>II</sub>	M <sub>III</sub>	M <sub>IV</sub>	M <sub>V</sub>
L <sub>I</sub>	.	.	.	.	.	.	.	.	.
L <sub>II</sub>	$\alpha_2$	.	.	.	.	.	.	.	.
L <sub>III</sub>	$\alpha_1$	.	.	.	.	.	.	.	.
M <sub>I</sub>	.	.	$\eta$	.	.	.	.	.	.
M <sub>II</sub>	$\beta_2$	$\beta_4$	.	.	.	.	.	.	.
M <sub>III</sub>	$\beta_1$	$\beta_3$	.	.	.	.	.	.	.
M <sub>IV</sub>	.	.	$\beta_1$	$\alpha_2$	.	.	.	.	.
M <sub>V</sub>	.	.	.	$\alpha_1$	.	.	.	.	.
N <sub>I</sub>	.	.	$\gamma_5$	$\epsilon$	.	.	.	.	.
N <sub>II</sub>	$\gamma_2$	$\gamma_7$	.	.	.	.	.	.	.
N <sub>III</sub>	$\gamma_1$	$\gamma_3$	.	.	.	.	.	.	.
N <sub>IV</sub>	.	.	$\gamma_1$	$\beta_2'$	.	$\epsilon$	.	.	.
N <sub>V</sub>	.	.	.	$\beta_2$	.	.	$\gamma$	.	.
N <sub>VI</sub>	.	.	.	.	.	.	.	$\beta$	$\alpha_2$
N <sub>VII</sub>	.	.	.	.	.	.	.	.	$\alpha_1$
O <sub>I</sub>	.	.	$\gamma_{II}$	$\beta_1$	.	.	.	.	.
O <sub>II</sub>	.	$\gamma_4'$	.	.	.	.	.	.	.
O <sub>III</sub>	$\delta_1$	$\gamma_4$	.	.	.	.	.	.	.
O <sub>IV</sub>	.	.	$\gamma_2$	.	.	.	.	.	.
O <sub>V</sub>	.	.	.	$\beta_5$	.	.	$\delta$	.	.
P <sub>I</sub>	.	.	$\gamma_2'$	$\beta_5'$	.	.	.	.	.
P <sub>II</sub>	.	.	.	.	.	.	.	.	.
P <sub>III</sub>	.	$\gamma_8$	.	.	.	.	.	.	.

Эту таблицу объяснить легко. Название каждой линии написано в месте пересечения горизонтального ряда с вертикальным: ее частота представляет собой разность между спектральным термом, расположенным вверху вертикального ряда, и спектральным термом, в горизонтальном ряду. Таким образом линии одной и той же серии расположены в одной колонке.

Серия K образуется последовательностью дублетов:  $\alpha_1 - \alpha_2$ ,  $\beta_1 - \beta_2$ ,  $\gamma_1 - \gamma_2 \dots$  интервалы которых последовательно суживаются. Все эти дублеты расширяются по мере того, как возрастает атомный номер, а расхождение их частот возрастает как четвертая степень атомного номера. Такого сорта дублеты на-



зываются „правильными дублетами“, или „дублетами Зоммерфельда“. Серия  $L$  имеет структуру аналогичную серии  $K$ ; она точно также образуется из правильных дублетов, расстояние между компонентами которых уменьшается по мере восхождения в пределах серии.

Наоборот, серии  $L_{II}$  и  $L_{III}$  представляют картину, очень отличную от предыдущих. Гомологичные линии этих двух серий (фигурирующие в одном и том же ряду таблицы) образуют дублеты с постоянным расстоянием от одного конца серии до другого ( $\gamma_1 - \beta_1, \beta_1 - \alpha_2, \gamma_5 - \beta_6, \gamma_1 - \beta_2', \gamma_{11} - \beta_7, \gamma_2' - \beta_5'$ ). Это постоянное расстояние равно  $\nu_{LII} - \nu_{LIII}$  и изменяется как  $N^4$  в ряду элементов. Эти дублеты точно также относятся к „правильным дублетам.“

Законы спектров  $X$ -лучей можно резюмировать так: Спектральные термы  $X$ -лучей в общем изменяются как  $N^2$  (закон Мозели); разность между двумя последовательными спектральными термами одного и того же наименования ( $L, M \dots$ ), из которых первый имеет четный индекс, например  $\nu_{LII} - \nu_{LIII}$ , изменяется как  $N^4$  и кладет начало правильным дублетам.

Кроме того, заметим следующее: разность между двумя спектральными термами одного и того же наименования, из которых первый имеет нечетный индекс, например  $\nu_{LI} - \nu_{LII}$ , изменяется в последовательности элементов таким образом, что  $\sqrt{\nu_{LI}} - \sqrt{\nu_{LII}}$  остается постоянной и определяет то, что называется „неправильным дублетом“.

### 3. Классификация спектральных термов $X$ -лучей

Схема Бора и Косселя приводит к положению, что испускаемые спектральной серии  $X$ -лучей является результатом внутренней ионизации атома. Если эта ионизация заставляет переходить энергию атома от ее нормального значения  $W_0$  к значению  $W_n$ , характеристический спектральный терм серии есть  $\frac{W_n - W_0}{h}$

Допустим, что каждая электронная орбита может быть квантована отдельно; тогда можно предположить, что квантование введет три квантовых числа  $n, k, j$ , как и для оптических спектров. Следовательно, внутренняя ионизация, которой соответствует энергия  $W_n$ , может быть обозначена символом  $(n, k, j)$ , образованным тремя квантовыми числами, которые определяют орбиту электрона до ионизации. Из этого следует, что мы должны найти соответствие каждого спектрального терма  $X$ -лучей одному из символов  $(n, k, j)$ , уже встречавшихся в оптических спектрах. Ибо изучение серий  $X$  показывает, что они имеют совершенно ту же структуру, что и спектры щелочных металлов. Следовательно, должно существовать однозначное соответствие между спектральными термами  $X$ -лучей и спектральными

термами щелочных металлов (таблица 2 предыдущей главы). Соответствие это следующее:

$$\begin{array}{cccccc}
 & & (1, 1, \frac{1}{2}) = K & & & \\
 & & 1s & & & \\
 (2, 1, \frac{1}{2}) = L_I & (3, 1, \frac{1}{2}) = M_I & (4, 1, \frac{1}{2}) = N_I & (5, 1, \frac{1}{2}) = O_I & (6, 1, \frac{1}{2}) = P_I & \\
 2s & 3s & 4s & 5s & 6s & \\
 (2, 2, \frac{1}{2}) = L_{II} & (3, 2, \frac{1}{2}) = M_{II} & (4, 2, \frac{1}{2}) = N_{II} & (5, 2, \frac{1}{2}) = O_{II} & (6, 2, \frac{1}{2}) = P_{II} & \\
 2p_1 & 3p_1 & 4p_1 & 5p_1 & 6p_1 & \\
 (2, 2, \frac{3}{2}) = L_{III} & (3, 2, \frac{3}{2}) = M_{III} & (4, 2, \frac{3}{2}) = N_{III} & (5, 2, \frac{3}{2}) = O_{III} & (6, 2, \frac{3}{2}) = P_{III} & \\
 2p_2 & 3p_2 & 4p_2 & 5p_2 & 6p_2 & \\
 & (3, 3, \frac{3}{2}) = M_{IV} & (4, 3, \frac{3}{2}) = N_{IV} & (5, 3, \frac{3}{2}) = O_{IV} & & (6) \\
 & 3d_1 & 4d_1 & 5d_1 & & \\
 & (3, 3, \frac{5}{2}) = M_V & (4, 3, \frac{5}{2}) = N_V & (5, 3, \frac{5}{2}) = O_V & & \\
 & 3d_2 & 4d_2 & 5d_2 & & \\
 & & (4, 4, \frac{5}{2}) = N_{VI} & & & \\
 & & 4f_1 & & & \\
 & & (4, 4, \frac{7}{2}) = N_{VII} & & & \\
 & & 4f_2 & & & 
 \end{array}$$

Из этой таблицы видно, что построение оболочек O и P не завершается даже в тяжелых атомах вследствие недостатка электронов.

Руководствуясь оптической аналогией, мы теперь видим, что серия K имеет спектральную формулу  $(1, s) - (n, p)$ : это есть, следовательно, первая главная серия дублетов, построенная, как серия дублетов щелочных металлов, которые постепенно суживаются. Серия L является „второй главной серией“ с формулой  $(2, s) - (n, p)$  и имеет аналогичную структуру. Таким образом объяснена аналогия серий K и  $L_1$ .

С нашей нынешней точки зрения, серии  $L_{II}$  и  $L_{III}$  распадаются на две совокупности линий. Первая совокупность образуется правильными дублетами с постоянным расстоянием и простыми компонентами  $\eta - l$ ,  $\gamma_6 - \beta_6$ ,  $\gamma_{11} - \beta_7$ ,  $\gamma_2' - \beta_5'$  и аналогична узкой серии  $(2, p) - (n, s)$  щелочных металлов. Вторая совокупность линий образует диффузную серию с формулой  $(2, p) - (n, d)$  и содержит наиболее интенсивные линии группы L; они образуют дублеты с постоянным расстоянием, которые, однако, имеют тонкую структуру благодаря сложности термов  $d$ . По приведенной выше таблице линий X-лучей можно, как и для оптических спектров, проверить правила отбора

$\delta k = \pm 1, \delta j = \begin{cases} 0 \\ \pm 1 \end{cases}$ . Классификация линий X-лучей по аналогии с дублетными спектрами щелочных металлов, распространяющаяся до серий M и N, дает совершенно ясную и связную схему.

#### 4. Теоретическое толкование. Формула тонкой структуры Зоммерфельда

Посмотрим теперь, как пытались объяснить поведение спектральных термов X-лучей в прежней квантовой теории. Самое старое и самое простое представление состояло в том, что атом с атомным номером  $N$  считали содержащим  $N$  планетарных электронов, вращающихся по концентрическим круговым орбитам, находящимся в одной плоскости (круг  $K$ , круг  $L$  и т. д.). Чтобы грубо представить себе взаимодействие электронов, предполагают, что оно может быть представлено просто как экранирующий эффект, который проявляется как бы в уменьшении заряда ядра. Таким образом, электрон  $K$  будет подвергаться действию силы  $(N-k) \frac{e^2}{r^2}$ , электрон  $L$  — действию силы  $(N-l) \frac{e^2}{r^2}$  и т. д.

причем  $k, l \dots$  называются „числами экранирования“. Следовательно, здесь без затруднений могут быть применены вычисления, действительные для водородного атома, и мы находим спектральные термы:

$$-\frac{R h (N-k)^2}{1^2} - \frac{R h (N-l)^2}{2^2} \dots \quad (7)$$

т. е. почти по закону Мозели. Эта первая приближенная теория явно недостаточна по многим причинам и особенно потому, что она предусматривает только один уровень  $L$ , один уровень  $M$  и т. д.

Чтобы объяснить множественность уровней в оболочках, Зоммерфельд ввел сюда еще динамику теории относительности, учитывая все круговые или эллиптические орбиты. Мы видели, что этим способом для атома с атомным номером  $N$ , ионизированного  $(N-1)$ -кратно, он нашел спектральные термы:

$$\left[ \frac{E_{nk}}{h} = - \frac{R N^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 N^2}{n^2} \left( \frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right] \right] \quad (8)$$

где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры и  $k$  — азимутальное квантовое число такое, что  $0 < k \leq n$ . Если принять, что отталкивание электронов можно грубо описать при помощи числа экранирования, то спектральный терм  $X$ , характеризующийся квантовыми числами  $n$  и  $k$ , дает формула:

$$\frac{E_{nk}}{h} = - \frac{R (N - z_{nk})^2}{n^2} \left[ 1 + \alpha^2 \frac{(N - z_{nk})^2}{n^2} \left( \frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (9)$$

где  $z_{nk}$  — число экранирования, относящееся к траектории, характеризующейся  $n$  и  $k$ . Так как для одного данного значения  $n$  число  $k$  может принимать  $n$  различных значений, формула (9) предусматривает 1 уровень  $K$ , 2 уровня  $L$ , 3 уровня  $M$ , 4 уровня  $N$  и т. д., чего, как мы это видели в предыдущем параграфе,

еще недостаточно. Теория Зоммерфельда, более полная, нежели первоначальная теория, все же еще слишком узка, так как она не вводит квантового числа  $j$ .

Тем не менее, несмотря на очевидную недостаточность, теория Зоммерфельда, казалось, пользовалась очень большим успехом благодаря тому, что дала количественное определение правильным дублетам.

Возьмем для примера правильные дублеты серий L. Они происходят от комбинации одного и того же термина M, N и т. д. с терминами  $L_{II}$  и  $L_{III}$  соответственно. Следовательно, две линии дублетов имеют частоты формы  $\nu_{LII} - \nu_i$  и  $\nu_{LIII} - \nu_i$ . Разность их частот  $\delta\nu_L$  или расстояние дублета есть  $\nu_{LII} - \nu_{LIII}$ . В своей теории Зоммерфельд обошел уровень  $L_I$ , как провизорно необъяснимый, и приписал уровням  $L_{II}$  и  $L_{III}$  соответственно квантовые числа  $n=2, k=1$  и  $n=2, k=2$ . В результате <sup>1)</sup> формула (9) дала ему:

$$\delta\nu_L = \nu_{LII} - \nu_{LIII} = R \alpha^2 \frac{(N - z_L)^4}{2^4} \left( \frac{2}{1} - \frac{2}{2} \right) = \frac{\pi^4 m e^8}{2 c^2 h^5} (N - z_L)^4 \quad (10)$$

Расстояние дублетов L должно, таким образом, изменяться как  $(N - z_L)^4$ , а это с достаточной точностью представляет закон, выведенный экспериментальным путем, ибо для атомов не слишком легких  $z_L$  должно быть малым по сравнению с N. Если положим  $N=1, z_L=0$ , то мы снова вернемся к расстоянию  $\Delta\nu_H$  дублетов серии Бальмера (формула (43) главы 1). Следовательно, мы имеем:

$$\delta\nu_L = \delta\nu_H (N - z_L)^4 \quad (11)$$

Формула (11) хорошо подтверждается численными экспериментальными данными, если положить  $z_L=3, 5$ , что является вполне резонной гипотезой. Дублеты серий M и N точно также предусматриваются числовыми вычислениями при применении формулы (9). Это точное предвидение правильных дублетов обеспечило первоначальный громадный успех теории тонкой структуры Зоммерфельда. Позднее возникло серьезное возражение, которое мы и изложим далее.

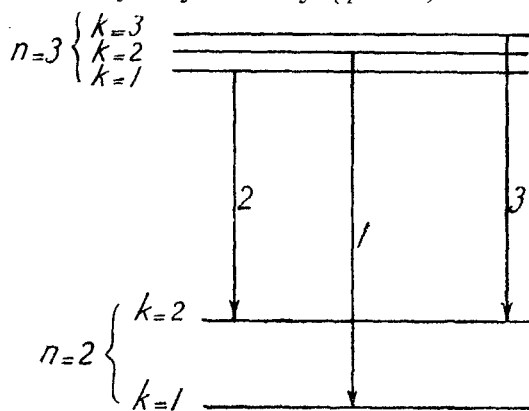
## 5. Недостаточность теории тонкой структуры Зоммерфельда

Вводя только два квантовые числа  $n$  и  $k$ , теория Зоммерфельда дала нам недостаточно уровней для спектров X-лучей. Нам нужно ввести третье число  $j$ ; оптическая аналогия заставляет нас распределить квантовые числа между уровнями так, как это показывает таблица (6). Но тогда возникает трудность, непреодолимая для теории Зоммерфельда. В самом деле по таб-

<sup>1)</sup> Приравнивая  $z_{21}$  и  $z_{22}$  и полагая оба равными  $z_L$ .

лице (б) уровни  $L_{II}$  и  $L_{III}$  имеют символы  $\left(2, 2, \frac{1}{2}\right)$  и  $\left(2, 2, \frac{3}{2}\right)$ ; следовательно, они имеют одно и то же число  $k=2$  и различаются своим числом  $j$ . Но это разрушает толкование правильных дублетов  $L$  при помощи формулы (9), которую дал Зоммерфельд, так как она предполагает, самое главное, что числа  $k$  для  $L_{II}$  и  $L_{III}$  различаются только на единицу. Пришлось поверить (что было, однако, большой неожиданностью), что успех теории Зоммерфельда был чисто случайным. Развитие более современных теорий и в особенности той, которая является предметом этой книги, показало затем, что этот успех был кажущимся. Только введение теории относительности позволило верно истолковать правильные дублеты, но при условии одновременного введения магнитного характера электрона. Именно отсутствие этого последнего элемента в теории Зоммерфельда и составляло ее слабость.

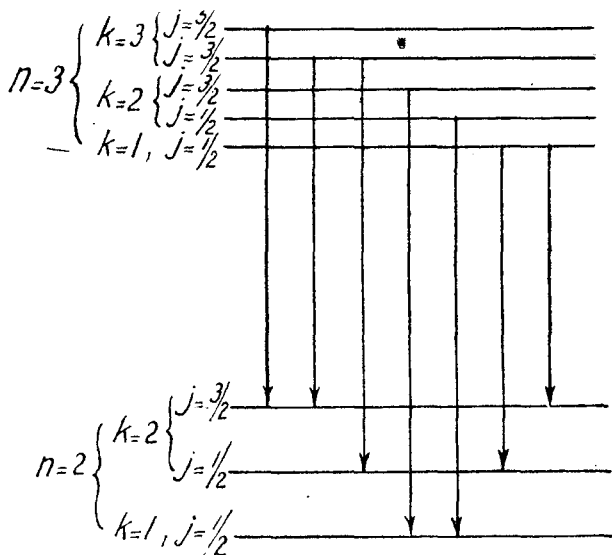
Как мы увидим дальше, внимательное изучение спектров X-лучей показывает недостаточность теории тонкой структуры Зоммерфельда. Но даже в простом случае с водородом углубленное изучение дублетов серии Бальмера показало, что его теория неправильно толковала и эти дублеты. Возьмем линию  $H_\alpha$  серии Бальмера. Она происходит в результате перехода одного стационарного состояния, для которого  $n=3$ , в другое стационарное состояние, для которого  $n=2$ . Эта линия в действительности является множественной (мультиплетной), и, если мы воспользуемся хорошо известным теперь способом представления уровней, теория Зоммерфельда для тонкой структуры этой линии дает следующую схему (фиг. 2):



Фиг. 2

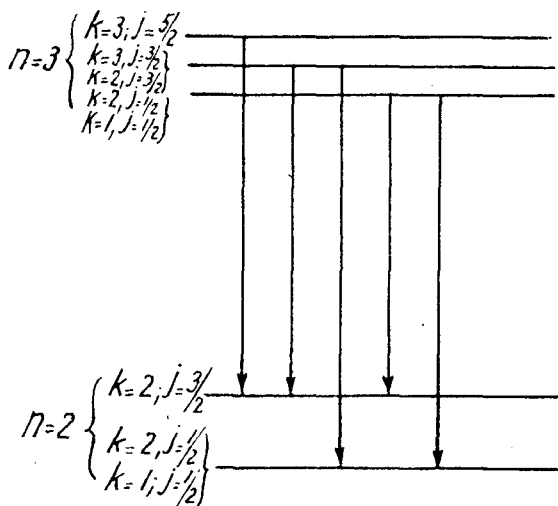
Применяя правило отбора  $\delta k = \pm 1$ , можно предвидеть три линии, указанные в тонкой структуре  $H_\alpha$ . Дублет Зоммерфельда образуется линией 1 и совокупностью 2 линий с очень близкими частотами 2 и 3, вообще мало различимых.

При помощи схемы с тремя квантовыми числами  $n, k, j$  тонкая структура представляется в следующем виде (фиг. 3):



Фиг. 3

Правила отбора  $\delta k = \pm 1$  и  $\delta j = 0, \pm 1$  подтверждают 7 линий, обозначенных на рисунке. Но в силу соображений, которые выяснятся позже, для водорода на основании новых теорий магнитного электрона необходимо считать равными уровни, которые имеют одно и то же  $j$  и различные  $k$ . Тогда мы получаем следующую упрощенную схему (фиг. 4):



Фиг. 4

Следовательно, в тонкой структуре  $H_\alpha$  должно быть 5 компонентов, тогда как Зоммерфельд предусматривал только 3. Тщательное изучение этой тонкой структуры подтвердило, что она предусматривает более 3 линий, тем самым подтверждая новую схему уровней, а не схему Зоммерфельда. Изучение дублетов  $He^+$  подтвердило это заключение.

Итак, даже для водорода и ионизированного гелия теория Зоммерфельда потерпела крушение, по крайней мере в своей первоначальной форме.

## 6. Распределение электронов по уровням. Правило Стонера

В тяжелом атоме, мы уже говорили, различные электроны распределяются в определенном количестве оболочек K, L и т. д. Эти оболочки, в свою очередь, распадаются на подоболочки или уровни: так оболочка L содержит уровни  $L_I$ ,  $L_{II}$  и  $L_{III}$ .

Мы видели, что каждая оболочка — может иметь не больше определенного числа электронов. Мы говорили о насыщении оболочек. Вполне естественно предположить наличие насыщения уровней. При помощи химических свойств элементов и характера их оптических и рентгеновских спектров различным авторам (Бор, Мен Сміт, Довилье и Л. де Бройли и проч.) удалось изучить распределение электронов по уровням для различных элементов. Таким образом пришли к предположению, какое максимальное число электронов может иметь каждый уровень. Стонер высказал по этому поводу правило, которое теперь считается общепризнанным: „Уровень, которому соответствует символ  $(n, k, j)$ , содержит максимум  $2j + 1$  электронов“.

Правило Стонера позволяет вычислить максимальное число электронов, принадлежащих к оболочке, определяемой данным значением главного квантового числа  $n$ .

Действительно, так как для данного значения  $k$   $j$  принимает значения  $k - 1 \pm \frac{1}{2}$ , уровни

$$(n, k, k - \frac{1}{2}) \text{ и } (n, k, k - \frac{3}{2})$$

обладают максимум

$$2(k - \frac{1}{2}) + 1 + 2(k - \frac{3}{2}) + 1 = 2(2k - 1)$$

электронов, а всего оболочка  $n$  содержит максимум:

$$2 \sum_{k=1}^n (2k - 1) = 2[n(n + 1) - n] = 2n^2 \quad (12)$$

Этот закон уже упоминался в параграфе 1.

## Магнитные аномалии и гипотеза вращающегося электрона

### 1. Жиромангнитные аномалии

Простые правила электродинамики позволяют установить общее соотношение между магнитным моментом  $\vec{M}$ , производимым смещением заряда под действием центральной силы, и постоянным моментом вращения  $\vec{M}$ , соответствующим этому движению. Рассмотрим плоскую замкнутую траекторию, проходящую через центр массы  $m_0$  с электрическим зарядом  $e$  под действием *центральной силы*<sup>1)</sup>. По теореме площадей момент вращения  $M = m_0 v r \sin \alpha$  есть постоянная.

Если  $da$  есть площадь, описываемая радиусом-вектором в течение времени  $dt$ , мы имеем:

$$da = \frac{1}{2} r v dt \sin \alpha = \frac{1}{2 m_0} M dt \quad (1)$$

Так как  $M$ , по теореме площадей, есть постоянная, при помощи интегрирования мы находим для периода  $T$  движения:

$$a = \frac{M}{2 m_0} T \quad (2)$$

где  $a$  — полная площадь траектории.

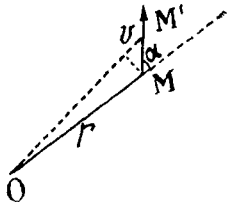
С другой стороны, движение заряда  $e$  эквивалентно существованию тока  $i$ . По определению, этот ток равен количеству электричества, которое проходит за секунду через единицу площади нормально к траектории. Так как ее пересекает заряд  $e$  в течение времени  $T$ , мы имеем:

$$i = \frac{e}{T} \quad (3)$$

предполагая  $e$  выраженным в электромагнитных единицах. Из (2) и (3) мы выводим:

$$i = \frac{M e}{2 m_0 a} \quad (4)$$

<sup>1)</sup> Массу частицы мы обозначаем через  $m_0$  вместо  $m$ , чтобы избежать в дальнейшем смешения этой массы с квантовым числом  $m$  и чтобы подготовить переход к релятивистским уравнениям.



$$MM' = v dt$$

Воздух  $MOM' = \frac{1}{2} r \cdot v dt \sin \alpha$

Фиг. 5



С магнитной точки зрения этот ток эквивалентен магнитному листку поверхности  $a$ . Магнитный момент  $\mathfrak{M}$  этого листка:

$$\mathfrak{M} = ia = \frac{\varepsilon M}{2 m_0} \quad (5)$$

По величине и направлению это соотношение действительно для векторов  $\vec{\mathfrak{M}}$  и  $\vec{M}$ ; откуда:

$$\frac{\vec{\mathfrak{M}}}{\vec{M}} = \frac{\varepsilon}{2 m_0} \quad (6)$$

В более общем виде можно показать, что, если рассматривать совокупность частиц одной и той же массы  $m$  и того же заряда  $\varepsilon$ , образующих систему в стационарном состоянии, соотношение (6) еще действительно между полным магнитным моментом  $\vec{\mathfrak{M}}$ , зависящим от движения этих зарядов и постоянным полным моментом вращения  $\vec{M}^1$ .

По теории Бора, атомы представляют собой совокупности электронов в стационарном движении. Следовательно, к атомам можно применить соотношение (6) при условии допущения  $\varepsilon = -\frac{e}{c}$ , где  $e$  есть положительный заряд, выраженный, как обычно, в электростатических единицах. Тогда для атомов мы имеем формулу:

$$\frac{\vec{\mathfrak{M}}}{\vec{M}} = -\frac{e}{2 m_0 c} (m_0 \text{ масса электрона}), \quad (7)^2$$

Эта основная формула приводит к идее „магнетона Бора“. Действительно, прежняя квантовая теория всегда полагала общий момент количества движения для атома равным целому кратному  $\frac{h}{2\pi}$ , откуда:

$$\mathfrak{M} = n \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{e}{2 m_0 c} = n \frac{eh}{4\pi m_0 c} \quad \begin{array}{l} (n \text{ целое} \\ \text{положительное или} \\ \text{отрицательное}) \end{array} \quad (8)$$

Таким образом, магнитный момент атома всегда будет целым кратным определенной единицы, называемой „магнетон Бора“ равной:

$$B = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \quad (9)$$

<sup>1)</sup> Это показал Эйнштейн. См. доклад де Гааза в *Atomes et Electrons (Rapports du Conseil de Physique Solvay de 1921, Gauthier-Villars, Paris, 1923)*.

<sup>2)</sup> Эта формула справедлива со своим знаком при следующих условиях: берут прямую систему осей и моменты определяют таким образом, что момент вращения частицы, вращающейся около оси  $z$  в положительном смысле (обратно направлению часовой стрелки), должен быть направлен в том же смысле вдоль оси  $oz$ .

Хорошо известный опыт Штерна и Герлаха с очевидностью доказал реальное существование магнетона Бора.

Соотношение (7), однако, не может быть проверено целиком общим способом. Исследовали, не начнет ли вращаться магнитный стержень, помещенный в магнитное поле. Теория, действительно, указывает, что стержень должен прийти во вращательное движение, причем отношение его магнитного момента к его моменту вращения дается соотношением (7). Такой феномен существует (опыты Эйнштейна и де Гааза), но отношение  $\left(\frac{M}{M}\right)$

найдено равным  $\frac{e}{m_0 c}$  вместо  $\frac{e}{2m_0 c}$ . Барнетт нашел то же аномальное отношение, изучая обратный феномен (намагничивание стержня при его вращении). Здесь кроется большая трудность, которая, как это мы увидим далее, приводит к идее собственного магнитного момента электрона.

## 2. Нормальный эффект Зеемана

Другая трудность, которая подсказала гипотезу магнитного электрона, это существование аномалий эффекта Зеемана.

Вспомним сначала вкратце классическую теорию нормального эффекта Зеемана, данную Лоренцом. Рассмотрим движение частицы массы  $m_0$  и заряда  $e$  в однородном магнитном поле  $H$ . Частица подвергается действию силы, равной:

$$F = \frac{e}{c} [\vec{v} \cdot \vec{H}] \quad (10)$$

Дж. Лармор дал очень интересную знаменитую теорему о движении, которое при этом получается: „Если рассматривать систему координат, которая вращается вокруг направления однородного магнитного поля с постоянной угловой скоростью:

$$\omega = -\frac{1}{2} \frac{eH}{m_0 c} \quad (\epsilon \text{ в эл.-стат. един}) \quad (11)$$

то движение частицы в этой системе координат такое, какое было бы в неподвижной системе координат в отсутствии магнитного поля при условии, что остальные силы остаются те же“.

Применим это к внутриатомному электрону, имеющему периодическое движение частоты  $\nu$ . Если создать однородное магнитное поле, то же самое движение могло бы совершаться электроном в системе координат, вращающейся со скоростью прецессии Лармора (11). Частота  $\frac{\omega}{2\pi}$ , соответствующая этой прецес-

сии, прибавляется или отнимается от частоты  $\nu$  движения электрона, смотря по относительной ориентации магнитного поля и орбиты. Выходит, что материальное тело, которое в отсутствии магнитного поля испускает радиацию частоты  $\nu$ , в присутствии равномерного магнитного поля  $H$  должно испускать также частоты  $\nu + \frac{1}{4\pi} \frac{eH}{m_0 c}$  и  $\nu - \frac{1}{4\pi} \frac{eH}{m_0 c}$ . Из теории следует также, что, наблюдая под прямым углом к магнитному полю, мы заметим линию частоты  $\nu$  с колебаниями в направлении поля и две линии частот  $\nu \pm \frac{1}{4\pi} \frac{eH}{m_0 c}$  с колебаниями под прямым углом к нему,

тогда как, наблюдая в направлении поля, мы должны заметить только две последние линии с круговыми колебаниями в противоположном направлении. Это и составляет нормальный эффект Зеемана, который действительно наблюдался в определенном числе случаев и открытие которого 30 лет тому назад, казалось, дало блестящее подтверждение электронных концепций Лоренца.

Прежняя квантовая теория не ввела ничего особенно нового в смысле предвидения эффекта Зеемана. Пусть имеем электрон в атоме в устойчивом состоянии в отсутствии внешнего магнитного поля; обозначим через  $W_0$  энергию этого электрона и через  $\vec{M}$  — магнитный момент его орбиты, допуская, что мы имеем право рассматривать изолированно один из электронов атома. В присутствии внешнего однородного магнитного поля  $H$  энергия электронной орбиты будет

$$W_H = W_0 - (\vec{M} \cdot \vec{H}) \quad (12)$$

или, в силу (6):

$$W_H = W_0 + \frac{e}{2m_0 c} (\vec{M} \cdot \vec{H}) \quad (13)$$

Чтобы составить  $(\vec{M} \cdot \vec{H})$ , мы должны взять составляющую  $\vec{M}$  вдоль поля, и эта составляющая, по прежней квантовой теории <sup>1)</sup> должна быть кратной  $\frac{h}{2\pi}$ . Таким образом, формула (13) принимает вид:

$$W_{H'} = W_0 + m \frac{e h H}{4\pi m_0 c} \quad (14)$$

$m$  есть квантовое число, которое называется „магнитным квантовым числом“.

Возьмем затем линию, обусловленную переходом электрона из устойчивого состояния с энергией  $W_0$  в устойчивое состояние

<sup>1)</sup> См. Léon Brillouin: *L'Atome de Bohr*, стр. 167.

с меньшей энергией  $W_0'$ . В отсутствии внешнего поля эта линия будет иметь частоту:

$$\nu_0 = \frac{W_0 - W_0'}{h} \quad (15)$$

В присутствии однородного поля  $H$  она в силу (14) становится:

$$\nu_H = \frac{W_H - W_H'}{h} = \nu_0 + (m - m') \frac{eH}{4\pi m_0 c} \quad (16)$$

где  $(m - m')$  может принимать всевозможные целые положительные и отрицательные значения, включая нуль. Чтобы отыскать нормальный эффект Зеемана, прежняя квантовая теория, руководствуясь принципом соответствия, принимала правило отбора  $\Delta m = 0, \pm 1$ . Тогда она возвращалась в точности к выводам классической теории, так как при комбинировании формул (14) и (15) исключалась постоянная  $h$ .

### 3. Аномалии эффекта Зеемана.

#### Множитель Ланде

Теория нормального эффекта Зеемана, изложенная в предыдущем параграфе, оправдалась только в небольшом количестве случаев. Большая часть эффектов Зеемана аномальна. Мы удовольствуемся описанием аномального эффекта Зеемана для щелочных металлов, ибо это наиболее простой случай, а также потому, что это единственный, который удалось объяснить теории Дирака, которая до сих пор не в силах учесть взаимодействие электронов.

Эффект Зеемана щелочных металлов подчиняется следующим общим правилам:

а) Гомологичные линии различных щелочных элементов дают один и тот же эффект Зеемана.

б) Линии одной и той же спектральной серии дают одно и то же расщепление (правило Престона).

в) Линии, смещенные под действием магнитного поля, всегда образуют относительно первоначальной линии симметричную фигуру в отношении частот и поляризации, как нормальный эффект.

г) Спектральный интервал (разность частот) между смещенной линией и первоначальной всегда равен произведению нормального интервала Лоренца на простую дробь (правило Рунге).

Таким образом, для определенной линии смещенные составляющие эффекта Зеемана всегда находятся в ряду частот на расстояниях от первоначальной линии, даваемых выражением

$\pm \frac{s}{r} \frac{eH}{4\pi m_0 c}$ , где  $r$  есть характеристическое целое рассматри-

ваемой линии (знаменатель Рунге) и где  $s$  принимает определенное число целых значений, число, которое определяет множественность расщепленной линии.

Правило (г) Рунге может быть истолковано следующим образом. По принципу комбинирования расщепление линии выражает разложение спектральных термов. Таким образом пришли к мысли, что каждый спектральный терм должен иметь свой знаменатель Рунге. Пусть  $r_1$  и  $r_2$  знаменатели двух спектральных термов; тогда правило Рунге можно формулировать так, что под влиянием магнитного поля эти термы соответственно изменяются в  $\frac{q_1}{r_1} \Delta \nu_H$  и  $\frac{q_2}{r_2} \Delta \nu_H$  раз, причем  $q_1$  и  $q_2$  — целые числа, а  $\Delta \nu_H$  обозначает нормальный интервал Лоренца  $\frac{eH}{4\pi m_0 c}$ . Линия, происходящая в результате комбинирования рассматриваемых термов, действительно подвергается спектральному смещению:

$$\left( \frac{q_1}{r_1} - \frac{q_2}{r_2} \right) \Delta \nu_H = \frac{q_1 r_2 - q_2 r_1}{r_1 r_2} \Delta \nu_H \quad (17)$$

и это можно написать в виде  $\frac{s}{r} \Delta \nu_H$ ; мы приходим к формулировке правила Рунге (г).

Способ, каким разлагаются спектральные термы в присутствии магнитного поля, точно определил Ланде, который много работал над выяснением аномальных эффектов Зеемана. Он высказал следующие правила:

1. Каждый спектральный терм с символом  $(n, l, j)$  (употребляя обозначение  $l = k - 1$ ) разлагается в *слабом* магнитном поле на  $2j + 1$  термов, характеризующихся *полуцелыми* магнитными квантовыми числами:  $-j, -(j-1) \dots + (j-1), +j$ .

2. Беря за единицу нормальный интервал Лоренца  $\frac{eH}{4\pi m_0 c}$ , расстояния между частотами расщепленных термов и первоначальным термом даются следующей таблицей:

Термы $s [n, 0, \frac{1}{2}]$	$-1 + 1$	(18)
Термы $p_1 [n, 1, \frac{1}{2}]$	$-\frac{1}{3} + \frac{1}{3}$	
Термы $p_2 [n, 1, \frac{3}{2}]$	$-\frac{6}{3} - \frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac{6}{3}$	
Термы $d_1 [n, 2, \frac{3}{2}]$	$-\frac{6}{5} - \frac{2}{5} + \frac{2}{5} + \frac{6}{5}$	
Термы $d_2 [n, 2, \frac{5}{2}]$	$-\frac{15}{5} - \frac{9}{5} - \frac{3}{5} + \frac{3}{5} + \frac{9}{5} + \frac{15}{5}$	

Эта таблица показывает, что знаменатели Рунге равны 1 для термов  $s$ , 3 — для термов  $p$ , 5 — для термов  $d$  и т. д. Обобщая, знаменатель Рунге для терма  $(n, l, j)$  равен  $2l + 1$ .

3. В переходах, которые обуславливают линии видимого спектра, квантовое магнитное число может изменяться только на  $-1, 0$  или  $+1$ . Для  $\Delta m = \pm 1$  испускаемая линия, если она наблюдается под прямым углом к полю, имеет прямолинейные колебания нормально направлению полю; для  $\Delta m = 0$ , наблюдаемая в тех же условиях, она имеет колебания параллельно полю.

При значениях магнитного числа  $m$ , данных правилом 1, Ланде написал расстояния, представленные в таблице (18), в форме  $mg$ , где  $g$  есть число, множитель Ланде, который имеет следующие значения:

$$\begin{array}{l}
 l; j = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \dots \cdot \frac{5}{2} \cdot \dots \cdot \frac{7}{2} \cdot \dots \cdot \\
 \parallel \\
 s \quad 0 \cdot \cdot 2 \\
 p \quad 1 \cdot \cdot \frac{2}{3} \cdot \cdot \frac{4}{3} \\
 d \quad 2 \cdot \cdot \cdot \frac{4}{5} \cdot \cdot \cdot \frac{6}{5} \\
 f \quad 3 \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \frac{6}{7} \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \frac{8}{7}
 \end{array} \quad (19)$$

Таблицу (19) можно резюмировать формулой:

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} = \frac{2j + 1}{2l + 1} \quad (20)$$

Таково значение множителя Ланде для термина  $(n, l, j)$  щелочного металла.

Спектральный терм атома щелочного металла, который в отсутствии поля имел значение  $(n, l, j)_0$ , в присутствии однородного поля Н может принимать  $2j + 1$  значений:

$$(n, l, j)_H = (n, l, j)_0 + mg \frac{e H}{4 \pi m_0 c} \quad (21)$$

причем  $g$  имеет значение (20), а  $m$  может принимать любое из целых значений между  $-j$  и  $+j$ .

Прежняя квантовая теория, точно также как и классическая теория, не в состоянии объяснить происхождение множителя  $g$ . Мы увидим, что и в волновой механике здесь посчастливилось не больше. Только введение магнетизма электрона позволило объяснить происхождение множителя  $g$ , форму которого нам позволила предусмотреть правильно и без возражений теория Дирака.

Формула (21) действительна только для слабого магнитного поля. Что же надо под этим подразумевать? Мы можем сказать, что магнитное поле, производящее аномальное расщепление Зеемана дублета щелочного металла, — слабо, если смещение спек-

1) Правило Престона (б) объясняется так, что расщепление Зеемана всегда независимо от главного числа  $n$ , то-есть только это число изменяется, когда переходят от одной линии к другой в пределах одной серии.

тральных термов, которое производит присутствие этого магнитного поля, — мало в сравнении с расстоянием между составляющими дублета в отсутствии поля. Согласно этому определению, то же самое магнитное поле может вести себя то как сильное, то как слабое, в зависимости от случая. Когда поле слабо в смысле, который только что был уточнен, формула (21) — применима. Когда оно не может считаться слабым, налицо более сложный феномен, подчиняющийся закону, сформулированному Фойтом, о котором мы здесь распространяться не будем. Но если поле очень сильно, то-есть если расщепление Зеемана, производимое им, велико по сравнению с нормальным расстоянием между компонентами дублета, снова получаем простой феномен, эффект Пашен-Бака. Тогда наблюдается *нормальное* расщепление Зеемана с центром в центре тяжести двух составляющих первоначального дублета.

#### 4. Гипотеза вращающегося магнитного электрона

Если взять законы аномального эффекта Зеемана и сравнить их с классической теорией Лоренца, мы заметим, что для их отыскания нужно вместо соотношения (7) иметь возможность поставить:

$$\left| \frac{\mathfrak{M}}{M} \right| = g \frac{e}{2 m_0 c} \quad (22)$$

Таким образом, это приводит нас к мысли, что в материи существуют моменты вращения и магнитные моменты, не связанные соотношением (7). Аномалии жиромангнитного эффекта, о которых говорилось в конце параграфа 1, приводят к тому же выводу. Следовательно, нельзя предполагать, что весь магнетизм атома происходит от вращения электронов, понимаемых, как точечные заряды. Таким образом, может возникнуть идея приписать самому электрону собственный магнитный момент и собственный момент вращения, которые связаны друг с другом соотношением, отличным от соотношения (7). Именно эту остроумную идею выдвинули Уленбек и Гаудсмит еще до развития новой механики.

Сделав из электрона образ классического типа, Уленбек и Гаудсмит превратили его в шар электричества, вращающийся около одного из своих диаметров и имеющий момент вращения  $M = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$  и магнитный момент, равный магнетону Бора  $\mathfrak{M} = \frac{eh}{4\pi m_0 c}$

таким образом, что для  $\left| \frac{\mathfrak{M}}{M} \right|$  значение равно  $\frac{e}{m_0 c}$ , как это показали опыты Эйнштейна и де Гааза. Так как отношение  $\left| \frac{\mathfrak{M}}{M} \right|$  для электрона является двукратным нормального отношения (7),

можно говорить о „двукратном“ магнетизме“ электрона. После успеха гипотезы Уленбека и Гаудсмита делались различные попытки получить классическую модель вращающегося электрона, но эти попытки в нынешнее время в значительной мере утратили свой интерес в связи с развитием новой механики, согласно которой мы не можем считать электрон маленьким телом, локализованным в пространстве.

Гипотеза вращающегося магнитного электрона с самого момента своего возникновения позволила нам предугадать разрешение трудностей, уже перечисленных нами. Возьмем сначала вопрос правильных дублетов X-лучей. Уленбек и Гаудсмит приняли, что магнитная ось электрона всегда бывает нормальна к плоскости своей траектории. Так как для вектора собственного момента вращения (часто называемого вектором „спина“) остается два возможных направления, каждой траектории квантовых чисел  $n$  и  $k$  соответствуют две возможности. Тогда становится понятной необходимость для завершения квантового определения устойчивой траектории ввести новое число  $j$ , способное принимать два различных значения для данных  $n$  и  $k$ . Полный момент вращения, представляющий сумму момента вращения электрона на своей орбите, равного  $k \frac{h}{2\pi}$ , и спина, равного  $\pm \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ , можно написать

$$M_{\text{полный}} = \left( k \pm \frac{1}{2} \right) \frac{h}{2\pi}. \quad (23)$$

Попробуем положить  $j = k \pm \frac{1}{2}$ . Однако, мы скоро увидим, что новая механика приводит к замещению  $k$  через  $l = k - 1$ . Мы увидим, следовательно, что действительная формула, связывающая  $j$  и  $k$ , будет уже приведенная формула

$$j = k - 1 \pm \frac{1}{2} = l \pm \frac{1}{2} \quad (24)$$

Тогда число  $j$  представится, как изображающее полный момент вращения в единицах  $\frac{h}{2\pi}$ . По классическим представлениям, маленький магнит, образованный электроном, перемещается в кулоновском поле или в квази-кулоновском поле ядра и каркаса. Тогда все это происходит так, как будто маленький магнит подвергается действию магнитного поля:

$$\vec{H} = -\frac{1}{c} [\vec{v} \cdot \vec{h}] \quad (25)$$

при чем  $\vec{h}$  — кулоновское поле. Формула (24) дает действие электростатического поля на магнитный полюс в движении со ско-



ростью  $\vec{v}$ . Так как поле  $H$  перпендикулярно к плоской орбите, описанной маленьким электронным магнитом в кулоновском поле, потенциальная энергия этого маленького магнита в поле  $H$  есть:

$$U = \pm \mathfrak{M} H \quad (26)$$

где  $\mathfrak{M}$  равно магнетону Бора, согласно гипотезе Уленбека и Гаудсмита, и где нужно брать знак  $+$  или  $-$ , в зависимости от направления момента  $\mathfrak{M}$ , нормального к траектории. Вследствие существования потенциальной энергии (25) каждый уровень  $(n, k)$  теории Зоммерфельда распадается на два уровня  $(n, k, j)$ . Вычисления, произведенные Уленбеком и Гаудсмитом, затем повторенные и усовершенствованные Томасом и Френкелем, пользуясь все время прежней квантовой теорией, позволили воссоздать закон в  $N^4$  для дублетов спектральных термов, у которых число  $j$  различается на единицу, и таким образом ликвидируются трудности, на которые натолкнулась первоначальная теория Зоммерфельда (см. параграф 5 последней главы). Но эти вычисления подают повод к возражениям и дают хорошие результаты только при условии применения искусственных гипотез, как, например, замещение квантовым числом  $l$  квантового числа  $k$ ; замещение, не оправдываемое, если исходить из прежней квантовой теории. В настоящее время уже ясно, что внутриатомные проблемы нельзя решать методами прежней механики, а необходимо прибегать к методам волновой механики. Поэтому мы не останавливаемся на вычислениях первоначальной теории магнитного электрона<sup>1)</sup>.

Гипотеза вращающегося магнитного электрона положила начало объяснению аномального эффекта Зеемана и формулы Ланде. Мы все время будем ограничиваться только случаем щелочных металлов. Внешний оптический электрон щелочного металла имеет полный момент вращения (момент орбитальный + спин), равный  $j = l \pm \frac{1}{2}$  раз  $\frac{h}{2\pi}$ , принимая несколько произвольное замещение  $l$  через  $k$ .

Какова же будет потенциальная энергия этого оптического электрона в присутствии внешнего магнитного поля  $H$ ? Примем, согласно прежней квантовой теории, что составляющая  $M_H$  полного момента вращения в направлении поля  $H$  будет вида  $m \frac{h}{2\pi}$ , где  $m$  — магнитное квантовое число, которое может принимать одно из полуцелых значений от  $-j$  до  $+j$ . Тогда общий магнитный момент образует с полем  $H$  угол, косинус которого будет  $\frac{m}{j}$ . Если бы электрон не имел собственного двойного магнетизма, его энергия в поле  $H$  будет:

<sup>1)</sup> См. Léon Brillouin, глава XV

$$W_H = W_0 - \mathfrak{M}_H \cdot H = W_0 + \frac{e}{2m_0 c} M_H H = W_0 + m \frac{e h H}{4 \pi m_0 c} \quad (27)$$

Мы снова возвратимся к формуле (14) и нормальному эффекту Зеемана. Но в силу двойного магнитного момента электрона мы имеем (все время ставя  $l$  вместо  $k$ ):

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_H &= -\frac{e}{2m_0 c} \cdot l \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{m}{j} + 2 \frac{e}{2m_0 c} \cdot \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{m}{j} = \\ &= -\frac{e}{2m_0 c} \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{l+1}{j} \cdot m \end{aligned} \quad (28)$$

а затем:

$$W_H = W_0 - \mathfrak{M}_H \cdot H = W_0 + m \frac{l+1}{j} \frac{e h H}{4 \pi m_0 c} \quad (29)$$

формулу, которая эквивалентна эмпирическому соотношению (21) при условии:

$$g = \frac{l+1}{j} = \frac{j \pm \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} = \frac{2j \pm 1}{2l \pm 1} \quad (30)$$

Эта формула, полученная при помощи довольно произвольных гипотез, представляет бесспорное родство с эмпирической формулой Ланде (20).

Гипотеза магнитного электрона, с грехом пополам развитая в прежней квантовой теории, дала все же интересные результаты. Но нынешний успех новой механики показал, что вопросы, относящиеся к электрону, нужно ставить совершенно иначе. Итак, нам необходимо теперь резюмировать основные концепции волновой механики. Одновременно мы посмотрим, как безуспешно пытались ввести в первоначальную форму этой новой механики релятивистские идеи. Эта попытка не дала возможности разрешить трудности, изложенные на предыдущих страницах. Только теория Дирака, введя одновременно в волновую механику и теорию относительности и собственный магнетизм электрона, смогла устранить эти затруднения.

## Глава V

### Краткое изложение принципов волновой механики

#### 1. Точка зрения новой механики

В прежней механике частицы или материальные точки рассматривали, как небольшие тела ничтожных размеров, имеющие в каждый данный момент вполне определенное положение в пространстве. Если частица находится в движении, совокупность ее последовательных положений составляет в таком случае ее траекторию. Классические уравнения ньютоновой механики (где уравнения несколько отличны от эйнштейновой механики) позволяют, зная силы, действию которых подвергается частица, и определенные начальные условия, предвидеть весь ход движения. Частице свойственно некоторое число величин таких, как ее координаты, энергия, составляющие количества ее движения, и таких, как величина ее момента вращения по отношению к точке и т. п.; прежняя механика приписывает этим величинам точно определенное в каждый данный момент значение, и ее уравнения позволяют точно вычислить последовательность этих значений во времени.

Совершенно отлична точка зрения новой механики, а именно: для нее величины, связанные с частицей, вообще не имеют точно определенных значений, вследствие чего больше не приходится строго говорить о положении в каждый данный момент и о траектории. В каждый данный момент каждой величине, связанной с частицей, можно приписать только определенное число возможных значений, причем каждое из них имеет определенную степень вероятности. Это значит, что, если в данный момент к искомой величине применить какой-нибудь измеритель, то этот измеритель даст одно из значений, предусмотренных как возможные. Вероятность того, что одно из этих возможных значений будет результатом измерения, может быть вычислена заранее.

Таким образом, в то время как целью прежней механики было, исходя из первоначального данного состояния, строго и точно предусмотреть движение, определяемое величинами, приписываемыми частице, — более скромной целью новой механики является только вычисление возможных значений этих величин в каждый данный момент со всеми им соответствующими вероятностями. С математической точки зрения, разница между обеими механиками заключается в следующем. В то время как старая теория исходит из дифференциальных уравнений, позволяющих выражать координаты материальных точек, как функцию

времени, новая исходит из уравнения в частных производных, имеющих форму волнового уравнения. Мы ознакомимся с нахождением этого основного уравнения, ограничившись случаем одной частицы, находящейся во внешнем поле, так как общий случай системы частиц, взаимодействующих друг с другом, легкий в трактовании волновой механики в ее первоначальной форме, нас здесь не интересует, ибо теории Дирака до сих пор не удалось удовлетворительным образом перенести его на магнитный электрон.

## 2. Нахождение нерелятивистского волнового уравнения

Мы напишем уравнение распространения новой механики в его первоначальной нерелятивистской форме. Это уравнение получается до некоторой степени автоматически, исходя из выражения энергии в прежней ньютоновой механике. Пусть частица с массой  $m$  движется в поле, имеющем потенциал  $U(x, y, z, t)$ . Классическое выражение энергии частицы есть:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 + U(x, y, z, t) \quad (1)$$

Количество движения есть, по определению, вектор:

$$\vec{p} = m \vec{v} \quad (2)$$

с компонентами  $p_x = m v_x$  и т. д.

Следовательно, между энергией и составляющими количества движения существует соотношение:

$$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z, t) \quad (3)$$

Правая сторона (3) может быть обозначена через  $H(x, y, z, t, p_x, p_y, p_z)$ : это гамильтоновская функция, которая выражает энергию в каждый данный момент  $t$ , как функцию координат частиц и составляющих количества ее движения (или моментов Лагранжа).

Теперь мы покажем, как находится уравнение распространения для рассматриваемой частицы в волновой механике. В гамильтоновской функции  $p_x$  замещается на  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $p_y$  на  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}$  и  $p_z$  на  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}$ ; таким образом получается оператор

$$H\left(x, y, z, t, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

называемый „гамильтоновским оператором“. Тогда мы получим волновое уравнение новой механики, написав:

$$H(\Psi) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (4)$$

где  $\Psi(x, y, z, t)$  — волновая функция частицы; функция, вообще, комплексная. Уточняя форму оператора  $H$ , легко находим следующее выражение для (4):

$$\Delta\Psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2} U(x, y, z, t) \Psi = \frac{4\pi i m}{h} \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (5)$$

где  $\Delta$  — хорошо известный оператор Лапласа. Так как волновое уравнение в отношении времени является уравнением первого порядка, оно позволяет вычислить форму волновой функции в каждый момент, если известна ее форма в первоначальный момент.

В очень важных случаях, где  $U$  не зависит от времени (постоянное внешнее поле), волновое уравнение допускает монохроматические решения, т. е. зависящие от времени только множителем формы  $e^{\frac{2\pi i}{h} Et}$ . Такая монохроматическая волна удовлетворяет уравнению:

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x, y, z)] \Psi = 0 \quad (6)$$

или уравнению Шредингера, которое представляет собой измененную форму (5).

В частном случае, когда  $U$  равно нулю (внешнее поле отсутствует), для монохроматических волн можно еще написать уравнение (6) с  $U=0$ , и в этом случае решением будет плоская монохроматическая волна:

$$\Psi = a e^{\frac{2\pi i}{h} [Et - \sqrt{2mE} (\alpha x + \beta y + \gamma z)]} \quad (7)$$

где  $a$  — постоянная амплитуда,  $\alpha, \beta, \gamma$  — направляющие косинусы направления распространения волны. Волна (7) имеет частоту  $\nu = \frac{E}{h}$  и длину волны  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{mv}$ .

Это плоская монохроматическая волна, которую волновая механика с самого начала приписывает свободному прямолинейному и равномерному движению частицы с массой  $m$ , энергией  $E$  и количеством движения  $mv$ .

### 3. Новая концепция механических величин частицы

Мы видим, что переход от прежней механики к новой совершается путем замещения составляющих количества движения операторами —  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$  и т. д. Это только один из частных случаев применения общей идеи новой механики, идеи, которая заключается в замещении операторами всех величин классической механики. Теперь будет своевременным уточнить, как

образуются эти операторы. Мы уже знаем, каковы операторы, соответствующие  $p_x, p_y, p_z$ ; с другой стороны, оператор, соответствующий энергии, есть определенный выше оператор Гамильтона  $H$ . Координате частицы, например  $x$ , считают соответствующим оператор  $x$  (что означает „умножить на  $x$ “). Все же остальные механические величины суть величины, производные от  $x, y, z, t, p_x, p_y$  и  $p_z$ . Следовательно, каждый раз, когда величина выражается целой рациональной функцией координат или моментов, мы умеем находить соответствующий оператор<sup>1)</sup>. Таким образом, например, составляющая  $z$  момента вращения частицы в отношении начала координат будет замещена оператором:

$$M_z = x p_y - y p_x = -\frac{h}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (8)$$

беря прямые оси и принимая, что вращательному движению в положительном направлении в плоскости  $xu$  соответствует положительный момент вращения.

Операторы, к отысканию которых привела нас волновая механика, как соответствующих измеримым механическим величинам, вообще представляют собой комплексные операторы, принадлежащие к особому классу: это эрмитовы операторы.

Вот как определяется класс эрмитовых операторов. На дальнейшее мы условимся во всей этой работе определенной буквой обозначать оператор или функцию, а та же буква со звездочкой будет представлять комплексно сопряженное количество. Приняв во внимание это условие, пусть  $A$  будет оператор того рода, который будем рассматривать. Если  $d\tau$  обозначает элемент объема  $dx dy dz$  пространства, оператор  $A$  является, согласно определению, эрмитовым, если имеем

$$\int f^* A(g) d\tau = \int g A^*(f^*) d\tau \quad (9)$$

При этом интегрирование распространяется по всему пространству, а функции  $f$  и  $g$  координат конечны и непрерывны во всем пространстве, стремясь к нулю на бесконечности достаточно быстро, чтобы полученные интегралы по поверхности при интегрировании по частям (9) были равны нулю. Все операторы, фигурирующие в волновой механике, — эрмитовы. Это легко доказать для каждого оператора и, в частности, например, для оператора  $M_z$  (8).

Кроме эрмитности, операторы волновой механики всегда имеют еще и другую общую черту: они линейны, т. е. всегда мы имеем:

$$A(\varphi_1 + \varphi_2) = A(\varphi_1) + A(\varphi_2) \quad (10)$$

а также

$$A(c\varphi) = c A(\varphi) \quad (11)$$

<sup>1)</sup> Здесь могла бы иметь место неопределенность в расположении множителей, но этим мы заниматься не будем, так как она нам здесь не встретится.

Нужно сказать, что между операторами, приписываемыми новой механикой каждой частице, существует важное отличие. Одни из них относятся к совокупности 3 координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и называются „полными операторами“. Другие относятся к одной или двум координатам и поэтому являются „неполными операторами“. Например, гамильтонов оператор  $H$  является полным, в то время как операторы  $p_x$  или  $M_z$  — неполные. Позже мы убедимся во всей важности этого различия.

Короче говоря, в волновой механике к каждой механической величине, приписываемой частице, мы относим один линейный эрмитовый оператор. Но совершенно очевидно, что при точном измерении одной из этих механических величин результат измерения выразится действительным числом. Таким образом, как это мы уже говорили в параграфе 1, целью новой механики является сказать нам, каковы действительные числа, которые нам может дать точное измерение значения механической величины. Следовательно, из одного эрмитового оператора, который новая механика ставит в соответствие величине, приписываемой частице, мы должны суметь вывести ряд действительных чисел, представляющих все возможные результаты точного измерения данной величины. А это возможно, так как все эрмитовы операторы волновой механики имеют ряд „собственных значений“, являющихся числами действительными. Вот это мы теперь и объясним.

#### 4. Собственные значения и собственные функции эрмитового оператора

Пусть  $A$  линейный эрмитовый оператор. Напишем уравнение:

$$A(\varphi) = \alpha\varphi \quad (12)$$

где  $\alpha$  постоянная, а  $\varphi$  — функция координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .

По определению, „собственными значениями оператора  $A$ “ мы назовем значения постоянной  $\alpha$ , для которых уравнение (12) допускает, по крайней мере, одно решение  $\varphi(x, y, z)$ , называемое „собственной функцией оператора  $A$ “, отличающейся такими свойствами<sup>1)</sup>: она везде конечна и непрерывна, и интеграл квадрата ее модуля по всему пространству имеет смысл и сходится. Естественно, если оператор  $A$  зависит от времени, он тоже имеет собственные значения и собственные функции.

Мы примем существование собственных значений линейных и эрмитовых операторов волновой механики, но мы покажем, что эти собственные значения обязательно действительны. В самом деле, уравнение, сопряженное с (12), пишется:

$$A^*(\varphi^*) = \alpha^*\varphi^* \quad (12^*)$$

<sup>1)</sup> Различными здесь считают только линейно независимые функции.

а так как  $A$  линейный оператор, мы имеем:

$$\int_D \varphi^* A(\varphi) d\tau - \int_D \varphi A^*(\varphi^*) d\tau = (\alpha - \alpha^*) \int_D \varphi \varphi^* d\tau \quad (13)$$

причем интегрирование распространяется по всей области  $D$  переменных, которые фигурируют в  $\varphi$ , т. е. в  $A$ . Но первый член (13) равен нулю, так как  $A$  является эрмитовым. Ввиду того, что интеграл второго члена существенно положителен, мы должны иметь  $\alpha = \alpha^*$ ; следовательно  $\alpha$  — число действительное.

Совокупность собственных действительных значений эрмитового оператора называется „спектром“ этого оператора. Этот спектр дискретен, если собственные значения изолированы, и сплошной, если они образуют непрерывную последовательность. Спектр может быть даже частично сплошным, частично дискретным. Сначала мы рассмотрим дискретные спектры.

Обозначим через  $\alpha_i$  собственное изолированное значение. Существует, по крайней мере, одна собственная функция  $\varphi_i(x, y, z)$ , которая ему соответствует. Совокупность собственных функций образует ортогональную систему в том смысле, что если  $\varphi_i$  и  $\varphi_j$  суть две собственные функции, соответствующие двум различным собственным значениям  $\alpha_i$  и  $\alpha_j$ , мы будем иметь:

$$\int_D \varphi_j^* \varphi_i d\tau = 0 \quad (14)$$

В самом деле, так как  $\alpha_i$  — действительны, мы имеем:

$$A(\varphi_j) = \alpha_j \varphi_j \quad A^*(\varphi_i^*) = \alpha_i \varphi_i^* \quad (15)$$

а следовательно:

$$\int_D \varphi_j A^*(\varphi_i^*) d\tau - \int_D \varphi_i^* A(\varphi_j) d\tau = (\alpha_i - \alpha_j) \int_D \varphi_i^* \varphi_j d\tau \quad (16)$$

Так как первый член вследствие эрмитности  $A$  равен нулю и  $\alpha_i \neq \alpha_j$ , согласно предположению, отлично от нуля, уравнение (14) доказано.

Доказательство непригодно для двух линейно независимых собственных функций, соответствующих одному и тому же собственному значению. Когда встречается такой случай, говорят, что налицо имеется вырождение и что собственное значение кратно. Пусть  $\alpha_i$  собственное кратное значение, которому соответствует  $p$  собственных линейно независимых функций  $\varphi_{i1}, \varphi_{i2}, \dots, \varphi_{ip}$ . Так как оператор  $A$  линейный, все линейные комбинации  $\varphi_{i1}, \dots, \varphi_{ip}$  являются решением  $A\varphi = \alpha_i \varphi$ . Тогда мы можем заменить  $p$  собственных линейно независимых функций  $\varphi_{i1}, \dots, \varphi_{ip}$  на  $p$  линейных линейно независимых комбинаций этих функций и легко видеть, что эти линейные комбинации можно выбирать таким образом, чтобы они были ортогональны между собой. Иначе говоря, когда собственное значение кратно, система соб-



ственных линейно независимых функций определена только с точностью до линейного преобразования, и этой частичной неопределенностью можно воспользоваться, чтобы получить систему собственных независимых функций, которые будут ортогональны. Таким образом, всегда можно считать, что совокупность собственных функций эрмитового оператора ортогональна.

Собственные функции эрмитового оператора определены только с точностью до постоянного комплексного множителя (даже без вырождения). Чтобы фиксировать модуль этого комплексного множителя, обычно „нормируют“ функции  $\varphi_i$ , т. е. полагают:

$$\int_D \varphi_i^* \varphi_i d\tau = \int_D |\varphi_i|^2 d\tau = 1 \quad (17)$$

уравнение, которое имеет смысл, так как  $|\varphi_i|^2$  суммируемо. Когда собственные функции нормированы, они имеют еще произвольный множитель формы  $e^{i\alpha}$ .

Вводя символ  $\delta_{ij}$ , равный единице, если  $i=j$ , и нулю, если  $i \neq j$ , можно формулы (14) и (17) свести к формуле:

$$\int_D \varphi_i^* \varphi_j d\tau = \delta_{ij} \quad (18)$$

Все предыдущие формулы применимы к дискретному спектру. Если оператор  $A$  имеет сплошной спектр, каждому собственному значению  $\alpha$  этого спектра соответствует одна собственная функция, которую мы напомним как  $\varphi(\alpha, x, y, z)$ , ибо при  $\alpha$ , непрерывно изменяющейся в сплошном спектре, более естественно написать ее как переменную, чем как индекс. Собственные функции  $\varphi(\alpha, x, y, z)$  ортогональны в отношении собственных функций дискретного спектра, если он имеется. Но, чтобы избежать определенных трудностей сходимости, при изучении сплошных спектров удобнее вместо самих собственных функций

$\varphi(\alpha, x, y, z)$  рассматривать выражения  $\frac{1}{\Delta\alpha} \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(\alpha, x, y, z) d\alpha$ , назы-

ваемые „собственными дифференциалами“, соответствующие интервалам  $\alpha \rightarrow \alpha + \Delta\alpha$ , выбранным настолько малыми, насколько это желательно в области непрерывного изменения  $\alpha$ . Употребление собственных дифференциалов приводит к замещению формулы (18) формулой:

$$\frac{1}{\Delta\alpha} \int_D d\tau \left[ \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi^*(\alpha, x, y, z) d\alpha \right] \left[ \int_{\alpha'}^{\alpha'+\Delta\alpha} \varphi(\alpha, x, y, z) d\alpha \right] = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (19)$$

Прежде чем закончить этот параграф, мы должны еще отметить одно очень важное свойство собственных функций линей-

ного эрмитового оператора  $A$ : они образуют „полную систему“. Это значит, что при весьма общих условиях функция переменных, связанных с  $A$  (переменных области  $D$ ), всегда может быть разложена в ряд по собственным функциям этого оператора. Если, например,  $f(x, y, z)$  есть функция трех переменных  $x, y, z$ , ее можно легко разложить в ряд по собственным функциям эрмитового оператора  $A$  в форме:

$$f(x, y, z) = \sum_i d_i \varphi_i(x, y, z) + \int d(\alpha) \varphi(\alpha, x, y, z) d\alpha \quad (20)$$

причем сумма  $\Sigma$  распространяется на дискретный спектр, а интеграл — по сплошному спектру.

Вводя собственные дифференциалы, соответствующие различным интервалам  $\Delta\alpha$  сплошного спектра, мы можем заменить (20) на

$$f(x, y, z) = \sum_i d_i \varphi_i(x, y, z) + \sum_{\Delta\alpha} d(\alpha) \left[ \frac{1}{\Delta\alpha} \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(x, y, z) d\alpha \right] \Delta\alpha \quad (21)$$

Пользуясь формулами (18) и (19), легко находим:

$$d_i = \int \varphi_i^* f(x, y, z) d\tau;$$

$$d(\alpha) = \int_D \left[ \frac{1}{\Delta\alpha} \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi^*(\alpha, x, y, z) d\alpha \right] f(x, y, z) d\tau \quad (22)$$

Количества  $d_i$  и  $d(\alpha)$  называются „коэффициентами Фурье“ разложения функции  $f(x, y, z)$  по собственным функциям оператора  $A$ . Ряд и интеграл Фурье входят в этот тип разложения, как простые частные случаи.

## 5. Основные принципы волновой механики

В первом параграфе настоящей главы мы уже говорили, что целью новой механики является вычисление возможных значений величин, приписываемых частице, и соответствующих им вероятностей. Затем мы научились связывать с частицей функцию  $\Psi(x, y, z, t)$ , решение уравнения (5), — волновую функцию, которую мы всегда предполагаем „нормированной“ по условию:

$$\int \Psi \Psi^* d\tau = 1 \quad (23)^1$$

Далее, мы с каждой величиной, приписываемой частице, связываем соответствующий линейный эрмитовый оператор, кото-

<sup>1</sup>) Далее мы докажем, что если условие (23) удовлетворено в определенный момент, то оно удовлетворено и во всякий другой момент.

рый позволяет определить совокупность действительных чисел, их собственные значения, а также полную систему нормированных ортогональных функций, их собственные функции.

Теперь мы можем формулировать два следующих основных принципа новой механики:

*Первый принцип*: Возможные в момент  $t$  значения величины, приписываемой частице, т. е. возможные результаты точного измерения, произведенного в момент  $t$ , этой величины, суть собственные значения в момент  $t$  линейного эрмитового оператора  $\Lambda$ , соответствующего этой величине.

*Второй принцип*: Если частица для волновой функции имеет определенное решение  $\Psi(x, y, z, t)$  своего волнового уравнения, вероятность, чтобы точное измерение величины, соответствующей полному оператору  $A$ , дало в момент  $t$  определенное собственное значение, равно квадрату модуля коэффициента при соответствующей собственной функции в разложении волновой функции  $\Psi$  по собственным нормированным и ортогональным функциям оператора  $A$ .

Более явно, если функция  $\Psi$  разлагается по собственным функциям  $A$  в форме (аналогично (21)):

$$\Psi = \sum_i c_i \varphi_i + \sum_{\Delta x} c(x) \left[ \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} \varphi(x) dx \right] \Delta x \quad (24)$$

то  $|c_i|^2$  дает вероятность собственного значения  $\alpha_i$ , а  $|c(x)|^2 \Delta x$  дает вероятность значения, находящегося в интервале  $\alpha \rightarrow \alpha + \Delta x$ . Функция  $\Psi$  нормирована и сумма вероятностей всех возможностей равна единице, как это легко проверить. Естественно, что вероятности, определяемые вторым принципом, вообще являются функциями времени  $t$ , т. е. момента измерения.

Если оператор  $A$  допускает кратные собственные значения, формулировка второго принципа должна быть дополнена. Пусть  $\alpha_i$  собственное кратное значение, которому соответствует  $p$  нормированных и ортогональных линейно независимых собственных функций  $\varphi_{i1} \dots \varphi_{ip}$ . Вероятность найти при измерении значение  $\alpha_i$  для рассматриваемой величины есть

$$|c_{i1}|^2 + |c_{i2}|^2 + \dots + |c_{ip}|^2,$$

т. е. сумма модулей коэффициентов при  $\varphi_{i1} \dots \varphi_{ip}$  в разложении  $\Psi$  по собственным функциям  $A$ . Эта вероятность является независимой от способа, каким выбирают  $p$  собственных функций  $\varphi_{i1} \dots \varphi_{ip}$ , как это и должно быть.

Когда оператор  $A$  неполный, формулировка второго принципа должна подвергнуться изменению. Действительно, тогда собственные функции  $A$  не содержат всех трех переменных  $x, y, z$  и в разложении (24)  $c_i$  и  $c(x)$ , очевидно, являются функциями переменных, не содержащихся в  $\varphi_i$  и  $\varphi(x)$ . Тогда вероятность собственного значения  $\alpha_i$  не может быть  $|c_i|^2$  количеством, ко-

торое будет зависеть еще от определенных переменных. Следовательно, чтобы получить вероятности, необходимо *проинтегрировать* указанные выше выражения по всей области переменных, которые не фигурируют в  $A$ . Например, если  $A$  зависит только от  $y$  и  $z$ ,  $c_i$  будут зависеть от  $x$  и вероятность значения

$\alpha_i$  будет не  $|c_i|^2$ , а  $\int_{-\infty}^{+\infty} |c_i|^2 dx$ . Легко убедиться, что это изменение вполне согласуется с идеей, что полная вероятность всех возможных гипотез должна быть равна единице.

Далее мы покажем несколько примеров применения общих принципов. Очень простой пример, это применение к гамильтоновому оператору, который, как мы знаем, является полным оператором. Для гамильтонового оператора уравнение (12), употребляя  $E$  вместо  $\alpha$ , мы напишем в виде:

$$H(\varphi) = E\varphi \quad (25)$$

Имеются собственные значения  $E_i$  и собственные функции  $\varphi_i$ . Эти значения и собственные функции зависят от времени, если от него зависит  $H$ , т. е. если система не консервативна. Точное измерение энергии может дать в результате только одно из значений  $E_i$ , относящихся к моменту  $t$  измерения, и вероятность получения значения  $E_k(t)$  равна квадрату модуля коэффициента при функции  $\varphi_k$  в разложении волновой функции  $\Psi$  частицы по собственным функциям энергии в момент  $t$ . Это то, что в других работах называется „принципом спектрального разложения“.

Попробуем теперь применить наши принципы к величине координаты  $x$  частицы. Уравнение (12) принимает форму:

$$x \cdot \varphi = \alpha \varphi \quad (26)$$

Это уравнение может рассматриваться, как удовлетворяющееся при всяком действительном значении  $\alpha$  функцией  $\delta(x - \alpha)$  или функцией Дирака, обладающей следующими свойствами:

1. Она является четной функцией аргумента  $(x - \alpha)$ .

2. Интеграл  $\int f(x) \delta(x - \alpha) dx$  равен нулю, если интервал интегрирования не содержит значения  $x = \alpha$  и равен  $f(\alpha)$  для всякой области интегрирования, содержащей это значение. Следовательно, уравнение (26) допускает сплошной спектр, содержащий все действительные значения  $\alpha$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ .

Таким образом, по первому принципу измерение координаты может *a priori* дать (как это и должно быть) любое из значений от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Далее, собственные дифференциалы

$\frac{1}{\Delta\alpha} \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \delta(x - \alpha) dx$  сплошного спектра, как это легко видеть, обра-

зуют полную нормированную и ортогональную систему. Так как по определению функций  $\delta$  мы имеем:

$$\Psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\alpha, y, z, t) \delta(x - \alpha) d\alpha \quad (27)$$

вероятность, что измерение координаты  $x$  дает величину, находящуюся в интервале  $\alpha \rightarrow \alpha + d\alpha$ , по второму принципу представляется в виде:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dy |\Psi(\alpha, y, z, t)|^2 d\alpha \quad (28)$$

Легко прийти к выводу, что вероятность, чтобы одновременное измерение трех координат дало значения, входящие в интервалы  $\alpha \rightarrow \alpha + d\alpha$ ,  $\beta \rightarrow \beta + d\beta$ ,  $\gamma \rightarrow \gamma + d\gamma$ , есть  $|\Psi(\alpha, \beta, \gamma, t)|^2 d\alpha d\beta d\gamma$ , а это приводит к тому, что вероятность, что измерение локализует частицу в элементе объема  $dx dy dz$  вокруг точки с координатами  $x, y, z$ , есть  $|\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$ . Это то, что в других работах называется принципом интерференции.

## 6. Величины одновременно и неодновременно измеримые

Из общих принципов, изложенных в предыдущих параграфах, мы выводим очень важное следствие: две механические величины могут быть одновременно точно измерены только в том случае, если соответствующие операторы  $A$  и  $B$  переставимы или, как выражаются, коммутативны, т. е. если  $AB = BA$ .

Действительно, если  $\varphi_i$  и  $\chi_i$  обозначают соответственно собственные функции  $A$  и  $B$ , а  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  — их собственные значения, то для того, чтобы можно было одновременно точно измерить обе рассматриваемые величины, нужно, чтобы мы могли одновременно приписать первой величине определенное значение  $\alpha_i$ , а второй — определенное значение  $\beta_i$ . Следовательно, по первому принципу должно быть возможным написать волновую функцию  $\Psi$  частицы в форме:

$$\Psi = c_i \varphi_i = d_i \chi_i \quad (29)$$

$c_i$  может зависеть от переменных, которые не фигурируют в  $\varphi_i$ , если  $A$  — неполный оператор, а  $d_i$  точно также может зависеть от переменных, которые не фигурируют в  $\chi_i$ , если  $B$  — неполный. Из предыдущего уравнения выводим:

$$AB(\Psi) = AB(d_i \chi_i) = A(d_i \beta_i \chi_i) = \beta_i A(c_i \varphi_i) = \beta_i \alpha_i \Psi \quad (30)$$

и

$$BA(\Psi) = BA(c_i \varphi_i) = B(c_i \alpha_i \varphi_i) = \alpha_i B(d_i \chi_i) = \alpha_i \beta_i \Psi \quad (31)$$

Тогда мы должны иметь

$$AB(\Psi) = BA(\Psi) \quad (32)$$

для всех значений  $\Psi$  в форме (29), что влечет за собою  $AB = BA$ .

Наиболее простой и важный пример величин, одновременно неизмеримых, представляют координата и соответствующая составляющая количества движения. Действительно, мы имеем:

$$xp_x - p_x x = \frac{h}{2\pi i} \left( \frac{\partial}{\partial x} x - x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{h}{2\pi i} \quad (33)$$

Иначе говоря, оператор  $xp_x - p_x x$  эквивалентен умножению на  $\frac{h}{2\pi i}$ . Значит,  $x$  и  $p_x$  не коммутативны, и, следовательно,

координата и соответствующая составляющая количества движения не могут быть с точностью измерены одновременно. Координата и соответствующий импульс Лагранжа, таким образом, известны в данный момент только с некоторыми неточностями  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$ , которые не могут быть одновременно равны нулю. Можно доказать, что мы всегда имеем:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \quad (34)$$

по крайней мере, по порядку величины. Неравенство (34) и два аналогичные неравенства для  $y$  и  $z$  составляют „соотношения неопределенности“ Гейзенберга, на которые мы неоднократно указывали в других своих работах<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> *Introduction à l'étude de la Mécanique ondulatoire*, Германи, Париж, 1930.  
*La théorie de la quantification dans la nouvelle Mécanique*, Германи, Париж, 1932.

В обеих этих работах имеется более подробное изложение принципов, кратко изложенных в настоящей и следующей главах.

## Глава VI

### Краткое изложение принципов волновой механики (продолжение)

#### 1. Некоторые сведения об алгебраических матрицах

„Матрицей“ называется таблица чисел, слагающаяся из конечного или бесконечного числа строк и столбцов. Если таблица имеет конечные размеры, мы предполагаем, что она квадратной формы. Можно было бы предположить ее, для обобщения, прямоугольной, но это внесло бы сейчас бесполезное для нас усложнение. Место каждого числа, фигурирующего в таблице (элемента матрицы), может быть определено с помощью двух индексов, соответственно обозначающих строку и столбец, к которым оно принадлежит. Итак, обозначим через  $a_{ik}$  элемент матрицы, внесенный в таблицу на пересечении  $i$ -той строки и  $k$ -того столбца; тогда матрица в целом будет представлена через  $A$  или  $\{a_{ik}\}$ . Элементы  $a_{ii}$  с одинаковыми индексами расположены по диагонали таблицы и называются „диагональными элементами“. Мы можем сказать, что две матрицы  $A$  и  $B$  равны и напишем  $A=B$ , если равны их элементы с одинаковыми индексами ( $a_{ik}=b_{ik}$ ).

В алгебре с матрицами приходится иметь дело, когда изучают линейные преобразования. В самом деле, если переменные  $x'_i$  представляют собой линейные комбинации других переменных  $x_i$ , мы будем иметь формулы преобразования типа:

$$x'_i = \sum_j a_{ij} x_j \quad (1)$$

формулы, которые можно представить в сжатом виде, написав векторное соотношение:

$$X' = AX \quad (2)$$

и условившись, что вектор  $AX$  имеет в качестве составляющей с индексом  $i$  величину  $(AX)_i = \sum_j a_{ij} x_j$ .

Формула (1) дает возможность определить сумму и произведение двух матриц, имеющих одинаковое число строк и столбцов, при следующих допущениях:

1. Сумма двух матриц  $A$  и  $B$  есть матрица  $A+B$ , элемент с индексами  $ik$  которой есть  $a_{ik}+b_{ik}$ .

2. Произведение матрицы  $B$  на матрицу  $A$  есть матрица  $AB$ ,  $ik$ -тый элемент которой есть  $(AB)_{ik} = \sum_l a_{il} \cdot b_{lk}$ .

Из определения 2 следует, что вообще произведение матриц  $BA$  не равно произведению матриц  $AB$ . Говорят, что вообще две матрицы не коммутативны. Если  $AB$  равно  $BA$ , матрицы антикоммутативны.

Элементы матрицы могут быть действительны или комплексны. Возьмем общий случай матриц с комплексными элементами. Следовательно, формулы преобразования (1) выражают, что мы переходим от некоторых комплексных переменных  $x_i$  к другим комплексным переменным  $x'_i$ . Теперь мы определим несколько особенно важных типов комплексных матриц.

Мы говорим, что матрица *эрмитова*, если элементы, симметричные по отношению к диагонали, являются комплексно сопряженными ( $a_{ik} = a_{ki}^*$ ). Диагональные элементы эрмитовой матрицы действительны. Если все элементы эрмитовой матрицы действительны, матрица симметрична по отношению к своей диагонали. Мы говорим, что матрица *антиэрмитова*, если имеем  $a_{ik} = -a_{ki}^*$ . Диагональные элементы антиэрмитовой матрицы чисто мнимые. Произведение двух эрмитовых матриц эрмитово только в том случае, если они коммутируют. Если они антикоммутативны, произведение антиэрмитово.

„Матрицей, сопряженной с матрицей  $A$ “, называют и обозначают через  $A^+$  матрицу, полученную из  $A$ , переставляя члены, симметричные по отношению к диагонали, и беря их комплексно сопряженные; тогда имеем  $a_{ik}^+ = a_{ki}^*$ . Из этого определения следует, что эрмитова матрица равна своей сопряженной: если  $A$  эрмитова, имеем  $A = A^+$ . Легко доказать формулу  $(AB)^+ = B^+ A^+$ , и очевидно, что  $(A^+)^+ = A$ .

Матрица называется „диагональной“ в том случае, когда только диагональные элементы не равны нулю. Очень важна эрмитова диагональная матрица, называемая единичной матрицей, которую пишут как  $I$ : это матрица,  $ik$ -тый элемент которой равен  $\delta_{ik}$ .

Если дана матрица  $A$  при наличии другой матрицы  $A^{-1}$  таким образом, что  $A \cdot A^{-1} = A^{-1} A = I$ , то матрица  $A^{-1}$  называется матрицей „обратной к  $A$ “. Эта обратная матрица, если она существует, всегда единственна. В том случае, когда  $A$  имеет конечное число строк и колонок, всегда существует обратная матрица, если детерминант, образованный с помощью таблицы  $a_{ik}$ , не равен нулю. В том случае, когда  $A$  имеет бесконечное число строк и столбцов, может не существовать  $A^{-1}$  и в каждом отдельном случае нужно проверить ее существование. Легко проверить формулу:  $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$ .

Когда  $A$  является действительной матрицей, такой, что:

$$\sum_i a_{ij} a_{ik} = \delta_{jk} \quad (3)$$

говорят, что матрица  $A$  ортогональна: она определяет ортогональное преобразование, которое оставляет инвариантной ве-



личину  $\sum_i x_i^2$ . Это хорошо известно. Для матриц с комплексными элементами это определение можно обобщить: если  $A$  представляет собой комплексную матрицу и если мы имеем:

$$\sum_i a_{ij} a_{ik}^* = \delta_{jk} \quad (4)$$

говорят, что  $A$  определяет комплексное ортогональное преобразование или, как еще говорят, она является „унитарной“. Для комплексного ортогонального преобразования количество  $\sum_i x_i^* x_i$  остается инвариантным. Условие (4) может быть написано:

$$\sum_i a_{ki}^+ a_{ij} = \delta_{kj} \quad \text{или} \quad A^+ A = 1; \quad A^+ = A^{-1} \quad (5)$$

Таким образом, чтобы матрица была унитарной, ее сопряженная должна совпадать с ее обратной матрицей.

Пусть  $A$  есть матрица и  $S$  — унитарная матрица, имеющие то же число строк и столбцов; тогда говорят, что матрица  $B = S^{-1}AS$  получена из  $A$  путем „канонического преобразования“. Если  $A$  эрмитова, то эрмитова и  $B$ . В самом деле, так как по предположению  $S^+ = S^{-1}$  и  $A^+ = A$ , мы имеем:

$$B^+ = (S^{-1}AS)^+ = S^+ A^+ (S^{-1})^+ = S^{-1}AS = B \quad (6)$$

Откуда вытекает важная теорема: каноническое преобразование превращает эрмитову матрицу в другую эрмитову матрицу<sup>1)</sup>.

## 2. Матрицы волновой механики

Допустим, что нам известна полная система нормированных и ортогональных функций:  $\varphi_1 \dots \varphi_n \dots$ ; мы назовем их фундаментальными функциями. Такую систему дает нам, например, совокупность собственных функций эрмитового оператора.

Если дана эта фундаментальная система, то каждому линейному оператору мы можем поставить в соответствие матрицу. Пусть, действительно,  $A$  будет линейный оператор; применение этого оператора к одной из фундаментальных функций  $\varphi_i$  дает нам функцию, которая может быть разложена по полной системе  $\varphi_1 \dots \varphi_n \dots$ . Следовательно, мы имеем соотношение вида:

$$A(\varphi_i) = \sum_j a_{ji} \varphi_j \quad (7)$$

<sup>1)</sup> Это положение непременно предусматривает, что матрица  $S$  канонического преобразования является унитарной.

откуда в силу свойств  $\varphi_i$

$$a_{ji} = \int_D \varphi_j^* A(\varphi_i) d\tau \quad (8)$$

где  $D$  является областью переменных, которые фигурируют в  $\varphi_i$ .

По определению,  $a_{ji}$  формулы (8) суть элементы матрицы, соответствующей оператору  $A$  в фундаментальной системе  $\varphi_i$ . Эту матрицу мы также обозначим буквой  $A$ . Если нам нужно уточнить систему функций, принятую как основание, мы сможем ее обозначить через  $A^c$ .

Полученные таким образом матрицы могут быть названы „матрицами волновой механики“. Теперь мы докажем, что они вполне удовлетворяют правилам сложения и умножения алгебраических матриц. Для этого возьмем два линейных оператора  $A$  и  $B$ . Мы получим:

$$A(\varphi_i) = \sum_j a_{ji} \varphi_j \quad B(\varphi_i) = \sum_j b_{ji} \varphi_j \quad (9)$$

откуда:

$$(A + B)(\varphi_i) = \sum_j (a_{ji} + b_{ji}) \varphi_j \quad (10)$$

Следовательно, элемент  $ji$  матрицы  $A + B$  есть  $a_{ji} + b_{ji}$ ; это и есть правило сложения алгебраических матриц. Кроме того, мы имеем:

$$AB(\varphi_i) = \sum_j b_{ji} A(\varphi_j) = \sum_j b_{ji} \sum_k a_{kj} \varphi_k = \sum_k \left( \sum_j a_{kj} b_{ji} \right) \varphi_k \quad (11)$$

Таким образом  $ki$ -тый элемент матрицы  $AB$  есть  $\sum_j a_{kj} b_{ji}$ ,

а это и есть правило умножения алгебраических матриц.

Условием, чтобы матрица  $A$  волновой механики была эрмитова, является:

$$a_{ji} = \int_D \varphi_j^* A(\varphi_i) d\tau = a_{ij}^* = \int_D \varphi_i A^*(\varphi_j^*) d\tau \quad (12)$$

Но мы знаем, что, если это условие выполнено для всех функций  $\varphi_i$ , оператор  $A$ , по определению, является эрмитовым, и наоборот. Следовательно, необходимым и достаточным условием, чтобы матрица волновой механики была эрмитовой, является условие, чтобы эрмитовым был оператор, от которого она происходит. Таким образом, эрмитность является свойством, присущим оператору в том смысле, что эрмитовый оператор дает во всякой фундаментальной системе функций эрмитову матрицу.

Поскольку все операторы, которые мы рассматриваем в волновой механике, эрмитовы, то эрмитовы равным образом и матрицы, которые им соответствуют.

### 3. Средние значения в волновой механике

Вообразим частицу и допустим, что нам известна приписываемая ей волновая функция  $\Psi$ . Пусть, с другой стороны, имеем одну из механических величин, приписываемых частице, которой в новой механике соответствует оператор  $A$ . Говоря об этой величине, мы сокращенно говорим „величина  $A$ “.

Общие принципы, изложенные в последней главе, позволяют нам предвидеть возможные значения величины  $A$  и соответствующие им вероятности. Принимая во внимание, что вообще существует несколько возможных значений с вероятностями, неравными нулю, нельзя говорить определенно о значении величины  $A$  в каждый данный момент, а можно говорить лишь о ее среднем значении, причем это среднее значение определяется обычным способом, как сумма произведений каждого возможного значения на соответствующую вероятность. Если  $\alpha_i$  и  $\varphi_i$  обозначают собственные значения и собственные функции  $A$  и если волновая функция  $\Psi$  допускает разложение:

$$\Psi = \sum_i c_i \varphi_i \quad (13)$$

то, согласно общих принципов, среднее значение  $\bar{A}$  есть

$$\bar{A} = \sum_i \alpha_i |c_i|^2 \quad (14)$$

Это можно написать в форме, принятой в волновой механике:

$$\bar{A} = \int_D \Psi^* A(\Psi) d\tau \quad (15)$$

Эквивалентность (14) и (15) следует из формулы:

$$\begin{aligned} \int_D \Psi^* A(\Psi) d\tau &= \int_D \sum_i c_i^* \varphi_i^* \cdot A \left( \sum_k c_k \varphi_k \right) d\tau = \\ &= \sum_{ik} c_i^* c_k \alpha_k \int_D \varphi_i^* \varphi_k d\tau \end{aligned} \quad (16)$$

и из того, что функции  $\varphi_i$ , нормированы и ортогональны. Среднее значение  $\bar{A}$ , определенное через (14) и (15), очевидно, есть действительная величина.

Рассуждения, путем которых мы приходим к выводу основной формулы (15), строго действительны только для полных операторов  $A$  без сплошного спектра и без кратных собственных значений. Однако, не представляет никакого труда распространить ее на неполные и вырожденные операторы и на сплошные спектры: формула (15) — общая.

Форма выражения (15) для  $\bar{A}$  позволяет нам сказать, что  $\Psi^* A(\Psi)$  является „плотностью среднего значения“ для вели-

чины  $A$ . Но эта „плотность“ несколько отличной природы от тех, которые рассматриваются в классических теориях. Действительно, элемент интегрирования  $\Psi^* A(\Psi) d\tau$  (который вообще является комплексным) ни в коем случае нельзя считать определенным количеством величины  $A$ , которая локализована в элементе  $d\tau$ , и только интеграл (15), который всегда действителен, имеет физическое значение. Это очень важное обстоятельство, которое нужно всегда иметь в виду.

Формула (15) дает статистическую интерпретацию матриц волновой механики или, по крайней мере, их диагональных элементов. Мы это покажем, рассматривая еще невырожденные полные операторы без сплошного спектра, ибо общие рассуждения приводят только к усложнениям, не меняя результата. Допустим, что разложение волновой функции  $\Psi$  по собственным функциям  $\varphi_i$  оператора  $A$  сводится к одному члену; тогда имеем

$$\Psi = c_i \varphi_i \quad (17)$$

причем  $|c_i| = 1$ , поскольку  $\Psi$  предполагается всегда нормированной. В этом случае мы уверены, что измерение величины  $A$  дает значение  $\alpha_i$ . Пусть теперь мы имеем другую величину  $B$ , приписываемую частице и соответствующую оператору  $B$ . Применяя формулу (15), мы получаем среднее значение величины  $B$  и находим:

$$\bar{B} = \int_D \Psi^* B(\Psi) d\tau = \int_D \varphi_i^* B(\varphi_i) d\tau \quad (18)$$

Второй интеграл (18) является диагональным элементом с матричными индексами  $ii$  оператора  $A$  в системе функций  $\varphi_i$ . Отсюда теорема: „Диагональный элемент с матричными индексами  $ii$  оператора  $B$  в системе собственных функций оператора  $A$  равен среднему значению величины  $B$ , когда известно, что величина  $A$  имеет значение  $\alpha_i$ “.

#### 4. Среднее значение координаты. Теорема Эренфеста

Рассмотрим одну из координат частицы, например, координату  $x$ . Ее среднее значение по формуле (15) и согласно принципу интерференций есть:

$$\bar{x} = \int_D x \Psi^* \Psi d\tau \quad (19)$$

Итак, это координата  $x$  „фигуральной жидкости“, плотность которой в любой точке дается:

$$\rho = \Psi \Psi^* \quad (20)$$

Эту фигуральную жидкость мы назовем „жидкостью вероятности“ (fluide de probabilité). Количество этой жидкости, содер-

жащееся в элементе объема  $d\tau$ , есть  $\Psi\Psi^* d\tau^1$ ), и полное количество жидкости остается постоянным во времени, равным 1, если функция  $\Psi$  нормирована. Так как распределение жидкости вероятности изменяется с течением времени, мы ей приписываем в каждой точке скорость, которую мы определяем через:

$$\vec{u} = \frac{1}{\Psi\Psi^*} \frac{h}{4\pi im} [\Psi \text{grad } \Psi^* - \Psi^* \text{grad } \Psi] \quad (21)$$

Легко показать, что в этих условиях жидкость вероятности сохраняется с течением времени и это лишний раз подтверждает следующее положение, точность которого мы уже признали: „Если функция  $\Psi$  нормирована в данный момент, она остается нормированной всегда“.

Вот доказательство. Из волнового уравнения, которому подчиняется функция  $\Psi$  (уравнение (5) предыдущей главы), и сопряженного уравнения легко вывести:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi\Psi^*) - \frac{h}{4\pi im} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) &= \\ = -\frac{h}{4\pi im} \sum_{x,y,z} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (22)$$

или еще, по определениям (20) и (21):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} (\rho \vec{u}) = 0 \quad (23)$$

Но уравнение (23) есть гидродинамическое уравнение непрерывности, которое выражает сохранение жидкости, распределение и движение которой определяются через (20) и (21).

Теперь отметим одно обстоятельство. По нашему определению средних величин, если  $f(x, y, z, t)$  является определенной скалярной или векторной функцией, мы должны назвать „средним значением этой функции в момент  $t$ “ количество:

$$f(t) = \int_D \Psi^* \cdot f(x, y, z, t) \cdot \Psi d\tau \quad (24)$$

А раз это так, то мы можем формулировать очень важную теорему Эренфеста:

**Теорема:** Точка с координатами  $x, y, z$  движется с течением времени так, как это делает по законам классической механики материальная точка массы  $m$  под действием силы, равной в каждый момент среднему значению  $\bar{f}(t)$  действительной силы.

<sup>1</sup> По принципу интерференций это количество, следовательно, равно „вероятности присутствия“ частицы в элементе  $d\tau$ .

Сначала по (19), применяя (22) и интегрируя по частям, мы имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{x}}{\partial t} &= \int_D x \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial t} d\tau = \frac{h}{4\pi i m} \int_D x \sum_{x,y,z} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] d\tau = \\ &= \frac{h}{4\pi i m} \int_D \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) d\tau = \int_D u_x \Psi^* \Psi d\tau = \bar{u}_x. \end{aligned} \quad (25)$$

Затем находим:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} &= \frac{h}{4\pi i m} \int_D \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial t} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x \partial t} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \right] d\tau = \\ &= \frac{h}{4\pi i m} \int_D \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) d\tau, \end{aligned} \quad (26)$$

которое в силу волнового уравнения дает:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} &= \frac{h^2}{8\pi^2 m^2} \int_D \left[ \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \left( \Delta \Psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2} U \Psi \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \left( \Delta \Psi^* - \frac{8\pi^2 m}{h^2} U \Psi^* \right) \right] d\tau. \end{aligned} \quad (27)$$

Далее, теорема Грина дает (после интегрирования по частям):

$$\int_D \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Delta \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Delta \Psi^* \right) d\tau = \int_D \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Delta \Psi - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\Delta \Psi) \right] dt = 0 \quad (28)$$

таким образом, что (27) дает нам:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} &= \int_D U \frac{\partial}{\partial x} (\Psi \Psi^*) d\tau = \\ &= \int_D \left( - \frac{\partial U}{\partial x} \right) \Psi \Psi^* d\tau = - \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = \bar{f}_x. \end{aligned} \quad (29)$$

Это и есть выражение теоремы Эренфеста для  $\bar{x}$ . Точно таким же образом находим и соответствующие формулы для  $y$  и  $z$ .

Заканчивая этот параграф, мы дадим, кроме того, определение средних плотностей электрического заряда и электрического тока, соответствующие частице заряда  $e$ , функция  $\Psi$  которой известна. Заряд  $e$ , будучи физической величиной, принимающей лишь одно значение, равен своему среднему значению, и мы можем написать:]

$$\bar{\varepsilon} = e = \int_D e \Psi \Psi^* d\tau. \quad (30)$$

Следовательно, мы можем рассматривать количество:

$$\delta = e \Psi \Psi^*, \quad (31)$$

как среднюю плотность электрического заряда, связанного с частицей. С другой стороны, с классической точки зрения, частица заряда  $\varepsilon$  при движении со скоростью  $\vec{v}$  эквивалентна элементу тока  $\vec{i} = \varepsilon \vec{v}$ . Здесь нам надо заменить  $v_x$  на  $\frac{1}{m} p_x$  и т. д. и тогда три составляющих  $i_x i_y i_z$  рассматриваемого тока будут соответствовать операторам

$$\frac{\hbar \varepsilon}{2\pi i m} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\hbar \varepsilon}{2\pi i m} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{\hbar \varepsilon}{2\pi i m} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Например, среднее значение  $i_x$  будет всегда по (15):

$$\bar{i}_x = -\frac{\hbar \varepsilon}{2\pi i m} \int_D \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} d\tau = \frac{\hbar \varepsilon}{4\pi i m} \int_D \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) d\tau. \quad (32)$$

и аналогичные ж выражения будем иметь для  $\bar{i}_y$  и  $\bar{i}_z$ . Из этих выражений вытекает, что векторное количество

$$\vec{j} = \frac{\hbar \varepsilon}{4\pi i m} [\Psi \text{ grad } \Psi^* - \Psi^* \text{ grad } \Psi] \quad (33)$$

может рассматриваться, как средняя плотность электрического тока, приписываемого частице. Сравнивая формулы (30) и (33) с формулами (20) и (21), мы видим, что плотности  $\delta$  и  $\vec{j}$  суть плотности заряда и тока, которые, по классической теории, будут существовать, если заряд  $\varepsilon$  частицы распределится пропорционально его плотности  $\Psi \Psi^*$ .

## 5. Первые интегралы в волновой механике

В классической механике „первым интегралом“ называется механическая величина, выражающаяся с помощью координат, импульсов и иногда времени, остающаяся постоянной во время движения в силу уравнений движения.

Как же определяется первый интеграл в новой механике? Вот ответ, который следует дать на этот вопрос: если механическая величина соответствует оператору  $A$ , эта величина есть первый интеграл в данной задаче (т. е. для данной формы гамильтоновской функции  $H$ ), если имеем

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{\hbar} (AH - HA) = 0 \quad (34)$$

где  $\frac{\partial A}{\partial t}$  представляет оператор, который получается, формально определяя выражение  $A$  по отношению к переменной  $t$ . Если  $A$  не зависит от  $t$ , то  $\frac{\partial A}{\partial t}$  есть нуль и условие (34) выражает просто.

что  $A$  коммутирует с  $H$ . Отсюда видно, что, если  $H$  не зависит от времени, условие (34) имеет следующее значение: матричные элементы, образованные из оператора  $A$  в системе собственных функций оператора  $H$ , постоянны.

Если поле постоянно,  $H$  не зависит от времени; очевидно, что энергия является первым интегралом; получаем классическую теорему. Если  $x$ —составляющая поля есть нуль,  $H$  не зависит от  $x$  и коммутирует с  $p_x$ :  $x$  составляющая количества движения есть первый интеграл, как и в классической механике, и т. д.

Наиболее интересный для нас случай, это момент вращения. Когда поле имеет цилиндрическую симметрию вокруг оси  $oz$ ,  $H$  не зависит от азимута  $\varphi$  вокруг этой оси. Беря прямые оси и допуская, что вращению в положительном направлении в плоскости  $xu$  соответствует положительный момент вращения, — оператор, соответствующий моменту вращения вокруг  $oz$ , есть:

$$M_z = xp_y - yp_x = \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (35)$$

Беря сферические координаты с полярной осью  $oz$ , мы находим:

$$M_z = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (36)$$

Следовательно,  $M_z$  не зависит от  $t$ , коммутирует с  $H$  и является первым интегралом. Если поле имеет сферическую симметрию вокруг  $O$ , каждый из моментов вращения  $M_x, M_y, M_z$  будет первым интегралом.

Мы можем упростить форму условия (34), введя оператор:

$$L = H - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \quad (37)$$

Так как при  $f$ , представляющем произвольную функцию, мы имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \cdot A(f) = \frac{\partial A}{\partial t}(f) + A \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right),$$

оператор  $\frac{\partial A}{\partial t}$  эквивалентен оператору  $\frac{\partial}{\partial t} \cdot A - A \cdot \frac{\partial}{\partial t}$ . Тогда условие (34) можно написать:

$$\begin{aligned} 0 &= (AH - HA) + \frac{h}{2\pi i} \left( \frac{\partial}{\partial t} \cdot A - A \cdot \frac{\partial}{\partial t} \right) = \\ &= A \left( H - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) - \left( H - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) A \end{aligned} \quad (38)$$

или просто

$$AL - LA = 0 \quad (39)$$

Итак условием, при котором величина  $A$  является первым интегралом, является коммутативность оператора  $A$  с  $L$ .



## Релятивистская форма волновой механики с одной волновой функцией

### 1. Несколько формул из релятивистской механики

Введение в механику принципа относительности еще задолго до возникновения новой механики привело Эйнштейна к изменению классических уравнений ньютоновой динамики. Впрочем, это изменение свелось к простому изменению некоторых формул. Релятивистская механика Эйнштейна сохранила все классические концепции материальной точки, скорости, траектории, механического детерминизма и т. п. В сравнении с новой механикой динамика Эйнштейна представляется, таким образом, лишь как незначительное изменение классической теории, имеющей целью согласовать ее с принципом относительности. В параграфе 2 главы V мы исходили из формул ньютоновой механики, чтобы получить уравнение распространения волновой механики. Таким образом мы получили волновую механику, которая, естественно, еще не является релятивистской. Чтобы получить релятивистскую волновую механику, кажется вполне естественным действовать как и в параграфе 2 главы V, но исходя из формул теории Эйнштейна. Для этого мы начнем с того, что напомним некоторые из этих формул.

В релятивистской механике каждая частица характеризуется инвариантной величиной  $m_0$ , ее собственной массой. Так как одним из основных принципов теории относительности является пропорциональность массы и энергии, частица массы  $m_0$  будет обладать даже в состоянии покоя внутренней энергией или „собственной энергией“; выражаемой через

$$W_0 = m_0 c^2 \quad (1)$$

где  $c$  — скорость света в пустоте. Если частица движется со скоростью  $v = \beta c$ , ее энергия:

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (2)$$

Пропорциональность между массой и энергией имеется еще и при условии, если считать, что в результате движения масса возрастает и становится равной  $\frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ .

„Кинетической энергией“ частицы, обладающей скоростью  $\beta c$ , можно назвать количество

$$T = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} - m_0 c^2 = m_0 c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right) \quad (3)$$

которое представляет возрастание энергии в результате движения.

Преыдушие формулы действительны в отсутствии поля. Если частица подвержена действию силового поля с потенциальной энергией  $U(x, y, z, t)$ , то вместо (2) можно написать

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} + U(x, y, z, t) \quad (4)$$

Если  $\beta$  мало по сравнению с единицей ( $v \ll c$ ), то мы получим в первом приближении

$$W = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m v^2 + U(x, y, z, t) \quad (5)$$

и, полагая

$$E = W - m_0 c^2, \quad (6)$$

мы возвращаемся к классической формуле. Следовательно,  $E$  это энергия в понимании классической механики, которая отличается от энергии  $W$  релятивистской механики на постоянную собственную энергию  $m_0 c^2$ .

Количество движения частицы массы  $m_0$ , обладающей скоростью  $v = \beta c$ , по теории Эйнштейна:

$$\vec{p} = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \vec{v} \quad (7)$$

Она равна произведению скорости на массу

$$\frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Три составляющие количества движения и количество

$$\frac{m_0 c}{\sqrt{1-\beta^2}} \left( = \frac{W}{c} \text{ в отсутствии поля} \right)$$

представляют 4 составляющих пространственно-временного вектора.

Преыдушие формулы должны быть изменены в очень важном случае, когда частица с электрическим зарядом  $e$  движется в электромагнитном поле. Известно, что электрическое поле  $\vec{h}$  и магнитное поле  $\vec{H}$  могут быть определены с помощью скалярного потенциала  $V(x, y, z, t)$  и векторного потенциала  $\vec{A}(x, y, z, t)$  из соотношений:

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}; \quad \vec{h} = -\text{grad } V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (8)$$

Сила, действующая в данном поле на частицу с зарядом  $\varepsilon$ , обладающую скоростью  $\vec{v}$ , дается формулой Лоренца:

$$\vec{f} = \varepsilon \left( \vec{h} + \frac{1}{c} [\vec{v} \cdot \vec{H}] \right) \quad (9)$$

Тогда энергия частицы:

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + \varepsilon V(x, y, z, t) \quad (10)$$

и количество ее движения:

$$\vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}} + \varepsilon \frac{\vec{A}(x, y, z, t)}{c} \quad (11)$$

Новое здесь в том, что количество движения, точно так же как и энергия, содержит, кроме члена, зависящего от скорости, также и член, зависящий от поля: вообще количество  $\vec{p}$  движения не направлено по скорости. Составляющие  $\vec{p}$  и величина  $\frac{W}{c}$  являются все еще компонентами пространственно-временного вектора.

Уравнения (10) и (11) дают нам соотношение:

$$\frac{1}{c^2} (W - \varepsilon V)^2 - \sum_{x, y, z} \left( p_x - \frac{\varepsilon A_x}{c} \right)^2 - m_0^2 c^2 = 0 \quad (12)$$

которое будет играть существенную роль при отыскании релятивистского волнового уравнения в волновой механике.

Если мы решим (12) в отношении  $W$ , мы получим:

$$W = c \sqrt{m_0^2 c^2 + \sum_{x, y, z} \left( p_x - \frac{\varepsilon A_x}{c} \right)^2} + \varepsilon V \quad (13)$$

Второй член этого уравнения может быть обозначен через  $H(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$  и представляет собой релятивистскую гамильтоновскую функцию. Это иррациональная функция.

## 2. Релятивистская волновая механика

Чтобы получить волновое уравнение релятивистской волновой механики, кажется вполне естественным действовать, как в параграфе 2 главы V, но исходя не из формул классической механики, а из формул релятивистской механики. К несчастью, здесь сразу же возникает трудность: так как гамильтоновская функция, определяемая вторым членом (13), иррациональна, выражение, получаемое при замещении  $p_x$  на  $-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$  и т. д.,

само иррационально по отношению к  $\frac{\partial}{\partial x}$  и т. д. и не представляет вполне определенного оператора. Следовательно, нельзя буквально применить метод параграфа 2 главы V, т. е. считать волновым уравнением уравнение

$$H(\Psi) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Однако, имеется обходной путь, чтобы избежать этой трудности; это пользуясь вместо (13) уравнением (12). Для этого заметим, что уже в нерелятивистском методе главы V при переходе от классического уравнения  $H = E$  к волновому уравнению

$$H(\Psi) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \text{ вообще энергию } E \text{ замещаем оператором } \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$$

Таким образом, вполне естественно и здесь заменить  $W$  тем же оператором; это тем более логично, что с релятивистской точки зрения энергия и количество движения образуют пространственно-временной вектор и, если замещать каждое  $p_i$  на  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i}$ ,

$W$  должно быть замещено на  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ .

Делая эти подстановки в первом члене (12), мы получаем:

$$\frac{1}{c^2} \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon V \right)^2 - \sum_{x,y,z} \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\varepsilon}{c} A_x \right)^2 - m_0^2 c^2 \quad (14)$$

то есть рациональный оператор.

Применяя оператор (14) к функции  $\Psi$  и приравнявая нулю, мы найдем:

$$\frac{1}{c^2} \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon V \right)^2 \Psi - \sum_{x,y,z} \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\varepsilon}{c} A_x \right)^2 \Psi = m_0^2 c^2 \Psi \quad (15)$$

и это уравнение может рассматриваться, как естественное релятивистское обобщение волнового уравнения в волновой механике в ее первоначальной форме.

Если мы раскроем уравнение (15), принимая во внимание соотношение Лоренца между потенциалами:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial V}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{A} = 0, \quad (16)$$

1) Разница обозначений объясняется тем, что

$$\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial t}$$

суть ковариантные составляющие, в то время как  $p_x, p_y, p_z, W$  суть контрвариантные составляющие пространственно-временного вектора.

мы получим

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Delta \Psi - \frac{4\pi i \varepsilon V}{h c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{4\pi i}{h} \sum_{x,y,z} \frac{\varepsilon A_x}{c} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \left. \frac{4\pi^2}{h^2} \left[ m_0^2 c^2 + \frac{\varepsilon^2}{c^2} (V^2 - A^2) \right] \Psi = 0. \quad (17)$$

По соображениям, которые мы изложим позднее, Дирак считает это уравнение недостаточным. К тому же мы сразу видим, что оно значительно отличается от нерелятивистского уравнения с одной важной точки зрения: это дифференциальное уравнение второго порядка по отношению к времени вместо дифференциального уравнения первого порядка.

В важном случае, когда электромагнитное поле равно нулю ( $V = \vec{A} = 0$ ), уравнение (17) примет вид:

$$\Delta \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{4\pi^2}{h^2} m_0^2 c^2 \Psi \quad (18)$$

и допускает, как частное решение, плоскую монохроматическую волну:

$$\Psi = C e^{\frac{2\pi i}{h} [Wt - p_x x - p_y y - p_z z]} \quad (19)$$

ибо по (12) мы имеем  $\frac{W^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = m_0^2 c^2$ . Волна (19) имеет

частоту  $\nu = \frac{W}{h}$  и длину волны  $\lambda = \frac{h}{p}$ ; она соответствует прямолинейному равномерному движению частицы, энергия и количество движения которой точно определены, в то время как ее положение совершенно неопределенно. Если сравнить формулу (19) с формулой (7) главы V, мы увидим, что единственная существенная разница, внесенная сюда теорией относительности, это замещение полной энергии  $W$  энергией  $E = W - m_0 c^2$  классической механики.

### 3. Плотность и поток вероятности, соответствующие уравнению (17)

Применение общих принципов, изложенных в главах V и VI, к волновому уравнению (17) вызывает большие трудности. В частности теряет ясный смысл положение, что волновая функция  $\Psi$  должна быть нормированной, ибо с помощью уравнения (17) нельзя более доказать, что, если  $\Psi$  нормирована в данный момент, она затем остается всегда нормированной. Эта трудность, как это мы увидим в главе X, обуславливается, главным образом, следующим обстоятельством. Так как уравнение (17) второго

порядка по отношению к времени, то его решение не является определенным, когда известна только первоначальная форма функции  $\Psi$ .

Тем не менее, при помощи уравнения (17) еще возможно рассмотрение потока вероятности, который сохраняется во времени в силу именно волнового уравнения, но плотность этого потока выражается в функции не только  $\Psi$ , но так же и  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

Действительно, возьмем

$$\rho = -\frac{h}{4\pi i m_0 c^2} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) - \frac{\varepsilon}{m_0 c^2} \nabla \Psi \Psi^* \quad (20)$$

$$\vec{\rho} \vec{u} = \frac{h}{4\pi i m_0} (\Psi \text{ grad } \Psi^* - \Psi^* \text{ grad } \Psi) - \frac{\varepsilon}{m_0 c} \vec{A} \Psi \Psi^* \quad (20')$$

уравнения, которые определяют распределение и движение фиктивного потока вероятности, ибо  $\rho$  и  $\vec{\rho} \vec{u}$  действительны.

Напишем теперь уравнение, сопряженное с (17):

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} - \Delta \Psi^* + \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} +$$

$$+ \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c} \sum_{x,y,z} A_x \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} + \frac{4\pi^2}{h^2} \left[ m_0^2 c^2 + \frac{\varepsilon^2}{c^2} (V^2 - A^2) \right] \Psi^* = 0 \quad (17')$$

Помножим (17) на  $\Psi^*$  и отнимем (17'), умноженное на  $\Psi$ . С одной стороны, мы находим выражения:

$$\frac{1}{c^2} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \right) - \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c^2} \nabla \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right),$$

которые можно написать:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{c^2} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) - \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c^2} \nabla \Psi \Psi^* \right] + \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c^2} \Psi \Psi^* \frac{\partial V}{\partial t},$$

с другой стороны, мы имеем выражения:

$$-\Psi^* \Delta \Psi + \Psi \Delta \Psi^* - \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c} \sum_{x,y,z} \left( A_x \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + A_x \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right),$$

которые мы можем написать:

$$\sum_{x,y,z} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c} A_x \Psi \Psi^* \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{4\pi i \varepsilon}{h} \frac{1}{c} \Psi \Psi^* \frac{\partial A_x}{\partial x} \right\}.$$

В общем мы получаем уравнение:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{c^2} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) - \frac{4\pi i \varepsilon}{h c^2} V \Psi \Psi^* \right] + \\ & + \operatorname{div} \left[ \Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi - \frac{4\pi i \varepsilon}{h c} \vec{A} \Psi \Psi^* \right] + \\ & + \frac{4\pi i \varepsilon}{h c} \Psi \Psi^* \left( \frac{1}{c} \frac{\partial V}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{A} \right) = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Последний член в силу соотношения Лоренца (16) равен нулю. Помножим на  $\frac{h}{4\pi i m_0}$  и учтем (20) и (20'). Получается:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{u}) = 0 \quad (22)$$

то-есть уравнение, которое выражает сохранение потока<sup>1)</sup>.

Соответственно распределению и движению потока вероятности, связанного с частицей с электрическим зарядом  $\varepsilon$ , мы можем взять электрическую плотность  $\rho \varepsilon$  и плотность тока  $\rho \varepsilon \vec{u}$ , как это мы делали в предыдущей главе в нерелятивистском случае.

Мы представим себе трудности, которые возникают в согласовании общих принципов, принятых в главе V, с релятивистской формой (17) волнового уравнения, если поступим таким же образом, каким мы доказали принцип интерференций в параграфе 5 этой же V главы. Из соображений, изложенных там, вытекает, что вероятность, чтобы измерение, сделанное в момент  $t$ , позволило локализовать частицу в элементе пространства  $d\tau$ , есть  $\Psi \Psi^* d\tau$ . Этот результат получается без применения какой-либо гипотезы об уравнении, которому подчиняется функция волны  $\Psi$ , и следовательно, оно должно быть действительным и здесь. Однако, плотность  $\rho$  потока вероятности, данная соотношением (20), плотность, выражение которой обусловлено необходимостью удовлетворить условию сохранения, не приводится к  $\Psi \Psi^*$ . Таким образом, имеется противоречие между общими принципами главы V и релятивистской формой (17) волнового уравнения. Именно стремление избежать это противоречие и привело Дирака к построению волновой релятивистской механики частицы на основаниях, отличных от (17).

<sup>1)</sup> Казалось бы, что  $\rho$  и  $\rho \vec{u}$  можно определить, взяв вторые члены (20) и (20'), умноженные на какую-нибудь действительную постоянную, но определения (20) и (20') необходимы, если хотят получить в ньютоновом приближении выражение  $\rho = \Psi \Psi^*$ , как в этом легко убедиться.

## Успехи и неудачи волновой механики с одной волновой функцией

### 1. Вычисление квантованной энергии. Пример водородного атома

Применяя свои общие принципы, волновая (нерелятивистская) механика определяет энергию стационарных состояний для квантованных систем, вычисляя собственные значения соответствующего гамильтоновского оператора. Этот новый метод квантования, введенный знаменитыми трудами Шредингера<sup>1)</sup>, привел в некоторых случаях к нахождению результатов старой квантовой теории, а в других случаях он исправил старые результаты в смысле большей согласованности с опытом (линейный осциллятор).

Здесь мы напомним лишь квантование водородного атома и, как Шредингер, воспользуемся нерелятивистской теорией.

Мы рассмотрим электрон массы  $m$  и заряда  $-e$  в поле, образованном неподвижным ядром заряда  $+e$ .

Напишем уравнение:

$$H(a) = E a \quad (1)$$

обозначая через  $H$  оператор  $\frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] - \frac{e^2}{r}$ .

Мы получаем:

$$\Delta a + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left[ E + \frac{e^2}{r} \right] a = 0. \quad (2)$$

Мы берем полярные координаты  $r, \theta, \varphi$  вокруг ядра и полагаем:

$$a(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi). \quad (3)$$

Принимая во внимание форму оператора Лапласа в полярных координатах, мы имеем:

$$Y \frac{d^2 R}{dr^2} + 2 \frac{Y dR}{r dr} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left[ E + \frac{e^2}{r} \right] R Y = 0 \quad (4)$$

<sup>1)</sup> См. E. Schrödinger, *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, J. A. Barth, Leipzig.



или еще

$$r^2 \left[ \frac{1}{R} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{1}{R} \frac{dR}{dr} + \frac{8\pi^2 m}{h} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \right] = -\frac{1}{Y} \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right] \quad (5)$$

Оба члена (5), зависящие один только от радиуса-вектора, а другой только от полярных углов, должны быть равны одной и той же постоянной  $\lambda$  и тогда мы имеем:

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \lambda Y = 0 \quad (6)$$

Можно доказать, что уравнение (6) имеет решения конечные и непрерывные на сфере с единичным радиусом только, если:

$$\lambda = l(l+1), \text{ где } l=0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Значения (7)  $\lambda$  суть собственные значения уравнения (6). Собственному значению, определенному определенным целым значением  $l$ , соответствуют  $(2l+1)$  собственных функций (нормированных):

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) = e^{im\varphi} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} \cdot (1 - \cos^2 \theta) \quad (8)$$

Функции  $Y_l^m$ , это сферические функции Лапласа. Они образуют полную систему для переменных  $\varphi$  и  $\theta$ , что уже a posteriori доказывает разложение (3).

Установивши это, мы, кроме того, видим, что из (5) вытекает, что  $R$  должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + R \left( A + \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \right) = 0 \quad (9)$$

при

$$A = \frac{8\pi^2 m E}{h^2}; \quad B = \frac{8\pi^2 m}{h^2} e^2; \quad C = l(l+1) \quad (10)$$

Шредингер показал, что все положительные значения  $E$  являются собственными значениями (9) и, следовательно, образуют сплошной спектр. Но эти собственные положительные значения энергии, как в классической механике, соответствуют свободным движениям электрона вне атома и здесь нас не интересуют.

Чтобы найти собственные отрицательные значения, введем действительную переменную

$$\rho = 2 \sqrt{-Ar} = \frac{4\pi}{h} \sqrt{-2mE} \cdot r \quad (11)$$

Из уравнения (9) очевидно, что при  $z$  очень большом  $R$  имеет асимптотическую форму  $e^{-\frac{\rho}{2}}$ , причем решения  $e^{+\frac{\rho}{2}}$  должно быть отброшено, ибо оно бесконечно на бесконечности. Итак положим:

$$R = e^{-\frac{\rho}{2}} v(\rho). \quad (12)$$

Подставляя (11) и (12) в (9), мы легко найдем:

$$d^2v/d\rho^2 + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{dv}{d\rho} + \left[ \left(\frac{B}{2V-A} - 1\right) \frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] v = 0 \quad (13)$$

Это линейное дифференциальное уравнение, имеющее на конечном расстоянии единственную особую точку  $\rho=0$ . Тогда теория линейных уравнений позволяет легко видеть, что уравнение (13) имеет только одно регулярное решение в окрестности точки  $\rho=0$ , конечное в этой точке, и что это решение имеет форму:

$$v(\rho) = \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{l+\nu} \quad (14)$$

Подставляя (14) в (13), мы находим рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} &[(\nu+l+1)(\nu+l+2) - l(l+1)] a_{\nu+1} = \\ &= \left[ \nu+l+1 - \frac{B}{2V-A} \right] a_{\nu} \end{aligned} \quad (15)$$

Функция  $R(\rho)$  будет равна нулю на бесконечности, если все  $a_{\nu} = 0$ , начиная с некоторого определенного  $a_p$ . По формуле (15) для этого необходимо, чтобы:

$$\frac{B}{2V-A} = p+l+1 = n \quad (n \text{ целое } \geq 1) \quad (16)$$

Откуда, согласно (10):

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2} \quad (17)$$

Следовательно, волновая нерелятивистская механика дает формулу Бора.

Заметим, что здесь имеется вырождение, ибо собственному значению  $E_n$ , то-есть данному значению  $n$ , по (16) соответствуют  $n$  возможных значений  $l$ , именно  $0, 1, \dots, n-1$  и каждому значению  $l$  соответствуют  $2l+1$  сферических функций  $Y_l^m$ . Следо-

вательно, одному собственному значению  $E_n$  соответствуют собственные функции  $a = RY$  в числе, равном

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2.$$

Таким образом, все собственные значения кратны, кроме того, которое соответствует  $n = 1$ .

Квантовое число  $l$  соответствует числу  $k-1$  старой квантовой теории. Оно может принять значения  $0, 1, \dots, n-1$ , в то время как число  $k$  старой теории принимало значения  $1, 2, \dots, n$ . Число  $m$  зависит от выбора полярной оси, целиком произвольного в отсутствии внешнего поля. Легко доказать, что моменты вращения  $M_x, M_y, M_z$  суть первые интегралы, как это и должно быть в силу сферической симметрии кулоновского поля.

Заметим, наконец, что, повторяя вычисления для атома с центральным зарядом  $+Ne$ , ионизированным  $(N-1)$ -кратно, мы находим:

$$E_n = - \frac{2 \pi^2 m e^4 N^2}{n^2 h^2} \quad (18)$$

откуда можно вывести, как и в прежней теории, утверждение, приближающееся к закону Мозели.

## 2. Тонкая структура и релятивистская волновая механика

Вычисляя возможные значения энергии для водородного атома, мы пришли к простому результату Бора. Вполне естественно теперь задаться здесь вопросом, а можем ли мы, пользуясь релятивистской формой волновой механики, развитой в предыдущей главе, найти тонкую структуру Зоммерфельда. Но здесь тотчас же возникает затруднение, так как мы не можем определить собственных значений гамильтонового оператора, ибо мы видели, что в теории предыдущей главы этот оператор недостаточно определен. Тем не менее, есть естественный (более или менее согласующийся с общими принципами) способ устранить это затруднение. Действительно, отыскание собственных значений энергии приводит к отысканию собственных частот волнового уравнения. Тогда возьмем релятивистское волновое уравнение (17) из последней главы и предположим, что  $\Psi$  монохроматическая волна, зависящая от времени только множителем  $e^{\frac{2\pi i}{h} W t}$ . Тогда, замечая, что в водородном атоме  $\vec{A} = 0$ , мы находим:

$$\Delta \Psi + \frac{4 \pi^2}{h^2 c^2} \left[ (W - \varepsilon V)^2 - m_0^2 c^4 \right] \Psi = 0 \quad (19)$$

В случае водородного атома  $\varepsilon = -e$  и  $V = \frac{e}{r}$ ; следовательно, скобки (19) примут вид:

$$\left(m_0 c^2 + E + \frac{e^2}{r}\right)^2 - m_0^2 c^4 = E^2 + 2 m_0 c^2 E + \frac{2 e^2}{r} (m_0 c^2 + E) + \frac{e^4}{r^2} \quad (20)$$

и так как, по предположению,  $\Psi = a(r, \theta, \varphi) e^{\frac{2\pi}{h} W t}$ , мы имеем:

$$\Delta a + \frac{4 \pi^2}{h^2 c^2} \left[ E^2 + 2 m_0 c^2 E + \frac{2 e^2}{r} (m_0 c^2 + E) + \frac{e^4}{r^2} \right] a = 0 \quad (21)$$

Подставляя сюда опять разложение (3), легко видеть, что  $Y(\theta, \varphi)$  должна быть сферической функцией Лапласа, и что  $R(r)$  должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{d^2 R}{d r^2} + \frac{2}{r} \frac{d R}{d r} + \left[ A + \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \right] R = 0 \quad (22)$$

с обозначениями:

$$A = \frac{8 \pi^2 m_0}{h^2} E \left( 1 + \frac{E}{2 m_0 c^2} \right); \quad B = \frac{8 \pi^2 m_0}{h^2} e^2 \left( 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right); \\ C = -l(l+1) + \frac{4 \pi^2 e^4}{h^2 c^2} \quad (23)$$

Выражение  $C$  можно также написать:

$$C = -l(l+1) + \alpha^2 \quad (23')$$

где  $\alpha = \frac{2 \pi e^2}{h c}$  есть постоянная тонкой структуры Зоммерфельда.

Из уравнения (22) мы выводим, что  $R$  имеет асимптотическую форму  $e^{-\frac{\rho}{2}}$ , где  $\rho = 2\sqrt{-A} \cdot r$  и полагая:

$$R(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} v(\rho), \quad (24)$$

мы получаем посредством подстановки в (22):

$$\frac{d^2 v}{d \rho^2} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{1}{2} \right) \frac{d v}{d \rho} + \left[ \left( \frac{B}{2\sqrt{-A}} - 1 \right) \frac{1}{\rho} + \frac{C}{\rho^2} \right] v = 0 \quad (25)$$

Это дифференциальное линейное уравнение, имеющее единственную особенность — на конечном расстоянии точку  $\rho=0$ . По общей теории линейных уравнений, существует два ре-

нения (25), регулярных по окрестности  $\rho = 0$ , имеющих форму:

$$v(\rho) = \rho^{\gamma} \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{\nu} \quad (a_0 \neq 0) \quad (26)$$

Показатель  $\gamma$  (необязательно целый) дается характеристическим уравнением:

$$\gamma(\gamma - 1) + 2\gamma + C = \gamma(\gamma + 1) + x^2 - l(l + 1) = 0, \quad (27)$$

которое можно написать еще так:

$$\left(\gamma + \frac{1}{2}\right)^2 = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - x^2 \quad (28)$$

Таким образом мы имеем два значения  $\gamma$ :

$$\gamma = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - x^2} \quad (29)$$

Мы отбрасываем решение соответствующее знаку  $-$ , замечая, что соответствующая функция  $v(\rho)$  будет иметь полюс для  $\rho = 0$ . Следовательно, мы сохраняем формулу (29) со знаком  $+$ . Нужно заметить, что даже со знаком  $+$  она вызывает небольшие затруднения, если  $l = 0$ , так как она тогда дает очень малое отрицательное значение  $\gamma$  и функция  $v(\rho)$  при  $\rho = 0$  — бесконечна (правда, очень малого порядка). Мы условимся пренебрегать этим затруднением, которое мы встретим снова в теории Дирака, потому что функция  $v(\rho)$ , хотя и бесконечна при  $\rho = 0$ , однако является квадратично суммируемой.

Если мы введем форму (26) в (25), мы получим рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} &[(\nu + \gamma + 1)(\nu + \gamma) + 2(\nu + \gamma + 1) + C] a_{\nu+1} = \\ &= \left[ \nu + \gamma + 1 - \frac{B}{2\sqrt{-A}} \right] a_{\nu}. \end{aligned} \quad (30)$$

Функция  $R$  будет равна нулю на бесконечности, если все  $a_{\nu}$  выше определенного  $a_p$  равны нулю. Это получится, если мы имеем:

$$p + \gamma + 1 = \frac{B}{2\sqrt{-A}} \quad (31)$$

Подставляя в (31) значения  $A$ ,  $B$  и  $\gamma$ , мы находим:

$$\frac{\alpha \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)}{\sqrt{-\frac{2E}{m_0 c^2} \left(1 + \frac{E}{2m_0 c^2}\right)}} = \left(p + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - x^2} \quad (32)$$

откуда

$$\left| \left( p + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - x^2} \right|^2 = \frac{-\frac{2E}{m_0 c^2} \left( 1 + \frac{E}{2m_0 c^2} \right)}{\left( 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right)^2} \quad (33)$$

Прибавляя по единице к обоим членам и беря обратные, легко получить:

$$1 + \frac{E}{m_0 c^2} = \left[ 1 + \frac{x^2}{\left| \left( p + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - x^2} \right|} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (34)$$

Это формула, аналогичная прежней формуле Зоммерфельда (формула (38) главы I), но где целые числа  $n_2$  и  $n_1$  соответственно заменены на

$$p + \frac{1}{2} \quad \text{и} \quad l + \frac{1}{2}$$

Если мы определим главное квантовое число  $n$  при помощи соотношения

$$n = \left( p + \frac{1}{2} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right) = p + l + 1 \quad (35)$$

и если мы разложим (34) по степеням  $x^2$ , пренебрегая членами порядка выше второго, мы получим приближенную формулу

$$E_{nl} = \frac{R h}{n^2} \left[ 1 + \frac{x^2}{n^2} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (36)$$

$R$  - постоянная Ридберга. Формулу (36) следует сравнить с формулой (41) главы I.

Проделав то же самое вычисление для атома с номером  $N$ , ионизированного  $(N-1)$ -кратно, вместо (36), мы находим:

$$E_{nl} = -\frac{R h N^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{x^2 N^2}{n^2} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (37)$$

формулу, аналогичную формуле (44) главы I.

В случае X-лучей, ограничиваясь грубым рассмотрением внутренних электронов, как образующих электростатический экран, мы получаем

$$E_{nl} = -\frac{R h (N - z_{nl})}{n^2} \left[ 1 + \frac{x^2 (N - z_{nl})}{n^2} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (38)$$

и эту формулу, дающую тонкую структуру спектральных термов X, нужно сравнить с прежней формулой (9) главы III.

К сожалению, согласованности прежних формул Зоммерфельда с опытными данными здесь не наблюдается. Возьмем, например, дублеты серии Бальмера. Линия из серии Бальмера, в примитивной схеме Бора, возникает во время перехода атома H из первоначального состояния энергии  $E_i$  в конечное состояние, характеризующееся  $n=2$ . По Зоммерфельду, квантовому числу  $n=2$  соответствуют два возможных значения азимутального квантового числа  $k=1$  и  $k=2$ . Отсюда вытекает тонкая структура каждой линии, которая в действительности является дублетом с расщеплением дублета по частоте, которое, согласно формуле (40) главы I, равно

$$\delta\nu = \frac{1}{h} (E_{22} - E_{21}) = \frac{R\alpha^2}{2^4} \left( \frac{2}{1} - \frac{2}{2} \right) = \frac{R\alpha^2}{16} = 0,36 \text{ см}^{-1} \quad (39)$$

Это число, хотя и несколько большее, достаточно хорошо сходится с опытными данными. С нашей новой формулой (36) мы должны двум соответствующим уровням дублетов Бальмера приписать квантовые числа  $n=2, l=0$  и  $n=2, l=1$  и мы находим:

$$\delta\nu = \frac{R\alpha^2}{2^4} \left( \frac{2}{1} - \frac{2}{3} \right) = \frac{R\alpha^2}{16} \cdot \frac{8}{3} \quad (40)$$

Следовательно, мы находим  $\frac{8}{3}$  прежнего числа, которое уже само было слишком большим!

Точно также и для лучей X мы найдем при помощи формулы (38) слишком большое число для расщепления дублета Зоммерфельда.

Кроме того, здесь все еще остается уже упоминавшееся затруднение: определено, по крайней мере, для лучей X, что соответственные уровни тонкой структуры Зоммерфельда имеют то же квантовое число  $k$  (то-есть то же число  $l=k-1$ ) и различаются квантовым числом  $j$ , которым предыдущая теория пренебрегает совершенно.

Таким образом, релятивистская волновая механика, изложенная в предыдущей главе, оказывается недостаточной, так как, не устраняя прежних трудностей, она, напротив, вводит новые.

### 3. Волновая механика с одной волновой функцией и эффект Зеемана

Теперь мы покажем, что примитивная волновая механика (с одной волновой функцией) не может дать объяснения аномалиям эффекта Зеемана.

Рассмотрим атом, находящийся в однородном магнитном поле  $\vec{H}$ . Возьмем направление поля за ось  $z$ : тогда мы можем написать векторный потенциал поля  $\vec{H}$  в форме:

$$A_x = -\frac{Hy}{2} \quad A_y = \frac{Hx}{2} \quad A_z = 0 \quad (41)$$

так как соотношение  $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$  дает  $H_x = H_y = 0$  и  $H_z = H$ . В таком случае релятивистское волновое уравнение (17) последней главы примет вид ( $\varepsilon = -e$ ):

$$\begin{aligned} \Delta \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \frac{4\pi i e V}{h c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \sum_{x,y,z} \frac{4\pi i e}{h c} A_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \\ = \frac{4\pi^2}{h^2} \left[ m_0^2 c^2 - \frac{e^2}{c^2} (V^2 - A^2) \right] \Psi = 0 \end{aligned} \quad (42)$$

Мы докажем, далее, следующую теорему, которая является ничем иным, как перенесением в волновую механику классической теоремы Лармора, изложенной в главе IV, параграфа 2:

*Теорема:* „Если поле  $H$  достаточно слабо и если пренебрегать поправками теории относительности, волновое уравнение атома, выраженное в системе координат, которая вращается вокруг направления поля  $H$  с угловой скоростью:

$$\omega = \frac{1}{2} \frac{eH}{m_0 c} \quad (43)$$

такое же, как если бы система координат не вращалась и поле  $H$  не существовало“.

Согласно нашим предположениям, мы считаем  $H$  малым и вовсе пренебрегаем  $H^2$ . Точно также мы предполагаем  $\eta = \frac{E}{m_0 c^2}$  малым (ньютонново приближение) и пренебрегаем  $\eta^2$ . Наконец, мы пренебрегаем произведением  $\eta H$ .

Мы берем систему прямых осей  $oxuz$  с осью  $oz$  в качестве цилиндрической оси. Определим цилиндрические координаты  $\rho, \varphi$  при помощи обычных формул

$$x = \rho \cos \varphi \quad y = \rho \sin \varphi \quad z = z \quad (44)$$

Тогда, благодаря (41), мы имеем:

$$\begin{aligned} \frac{4\pi i e}{h c} \sum_{x,y,z} A_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{2\pi i e}{h c} H \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = \\ = -\frac{2\pi i e}{h c} H \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (45)$$



и уравнение (42), пренебрегая  $A^2$ , мы напишем в цилиндрических координатах в виде:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \frac{4\pi i e V}{h c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{2\pi i e}{h c} H \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = \frac{4\pi^2}{h^2} \left( m_0^2 c^2 - \frac{e^2 V^2}{c^2} \right) \Psi. \quad (46)$$

Возьмем теперь систему цилиндрических координат  $z', \rho', \varphi'$ , которая вращается вокруг  $oz$  с угловой скоростью (43). Мы имеем:

$$z' = z \quad \rho' = \rho \quad \varphi' = \varphi - \omega t \quad t' = t \quad (47)$$

и следовательно (пренебрегая  $\omega^2$ ):

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z'}; \quad \frac{\partial}{\partial \rho} = \frac{\partial}{\partial \rho'}; \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi'}; \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} - \omega \frac{\partial}{\partial \varphi'}; \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial t'^2} - 2\omega \frac{\partial^2}{\partial \varphi' \partial t'} \quad (47')$$

Тогда уравнение (46) в штрихованных переменных примет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z'^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t'^2} + \frac{4\pi i e V}{h c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t'} + \frac{2\omega}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi' \partial t'} - \frac{4\pi i e V}{h c^2} \omega \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi'} - \frac{2\pi i e}{h c} H \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi'} = \frac{4\pi^2}{h^2} \left( m_0^2 c^2 - \frac{e^2 V^2}{c^2} \right) \Psi \quad (48)$$

или, принимая во внимание (43) и пренебрегая  $\omega$ , мы имеем:

$$\frac{2\omega}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi' \partial t'} = \frac{2\omega}{c^2} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \left[ \frac{2\pi i}{h} m_0 c^2 (1 + \gamma_1) \Psi \right] = \frac{2\pi i e}{h c} H \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi'} \quad (49)$$

Выражение  $\frac{2\omega}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi' \partial t'}$  в принятом приближении компенсирует последнее выражение в первом члене (48). Поскольку в ньютоновом приближении потенциальная энергия должна рассматриваться, как очень малая по сравнению с внутренней энергией  $m_0 c^2$ , выражение  $\frac{4\pi i e V}{h c^2} \omega \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi'}$  ничтожно по сравнению с выражением  $\frac{4\pi i e V}{h c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

В конце концов, уравнение (48) приводится к виду:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z'^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho'^2} + \frac{1}{\rho'} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho'} + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t'^2} + \frac{4\pi i}{h} \frac{eV}{c^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t'} = \frac{4\pi^2}{h^2} \left( m_0^2 c^2 - \frac{e^2 V^2}{c^2} \right) \Psi \quad (50)$$

Это уравнение точно такое же, как если бы штрихованная система не вращалась и поле  $H$  не существовало. Следовательно, теорема Лармора доказана.

Сейчас мы отыщем нормальный эффект Зеемана. Действительно, в отсутствии внешнего магнитного поля стационарное состояние, характеризуемое двумя квантовыми числами  $n$  и  $l$  и энергией  $E_{nl}^H$  в неподвижной системе  $z, \rho, \varphi$  определяется волновой функцией формы:

$$\Psi(z, \rho, \varphi, t) = F(\rho, z) e^{im\varphi} e^{\frac{2\pi i}{h} (m_0 c^2 + E_{nl}^0)t} \quad (51)$$

причем  $m$  — целое положительное или отрицательное число. В силу доказанной выше теоремы функция  $\Psi$  в присутствии поля  $H$  будет иметь ту же форму в системе  $z', \rho', \varphi'$ . Следовательно, мы будем иметь:

$$\Psi(z', \rho', \varphi', t') = F(\rho', z') e^{im\varphi'} e^{\frac{2\pi i}{h} (m_0 c^2 + E_{nl}^0)t'} \quad (52)$$

В силу (47) волновая функция выразится в неподвижной системе:

$$\begin{aligned} \Psi(\rho, \varphi, z, t) &= F(\rho, z) e^{im(\varphi - \omega t)} e^{\frac{2\pi i}{h} (m_0 c^2 + E_{nl}^0)t} \\ &= F(\rho, z) e^{im\varphi} e^{\frac{2\pi i}{h} (m_0 c^2 + E_{nl}^0 - \frac{mh}{2\pi} \omega)t} \end{aligned} \quad (53)$$

Тогда энергия  $E_{nl}^H$  атома в неподвижной системе в присутствии поля  $H$  есть:

$$E_{nl}^H = E_{nl}^0 - m \cdot \frac{h\omega}{2\pi} = E_{nl}^0 - m \cdot \frac{e h H}{4\pi m_0 c} \quad (54)$$

Таким образом, спектральные термы изменяются на величины кратные  $\frac{eH}{4\pi m_0 c}$  и линия частоты

$$\nu = \frac{1}{h} (E_{n'l'}^0 - E_{nl}^0)$$

в присутствии поля имеет частоту

$$\nu + (m - m') \frac{eH}{4\pi m_0 c}$$

Достаточно применить правило отбора  $\delta m = 0, \pm 1$ , которое мы докажем несколько далее, чтобы найти нормальный эффект Зеемана, но в этой теории нет и следа аномалий и множителя Ланде. Следовательно, волновая механика с одной волновой функцией дает не больше, чем классическая теория или прежняя квантовая теория.

#### 4. „Правила отбора“ в волновой механике

По классической электродинамике, когда распределение электричества находится в неравномерном движении, имеется электромагнитное излучение. Если  $\rho(x, y, z, t)$  есть плотность распределения, интенсивность происходящего излучения определяется в первом приближении электрическим моментом, то есть вектором  $\vec{m}$  с прямоугольными составляющими:

$$m_x = \iiint \rho x \, dx \, dy \, dz; \quad m_y = \iiint \rho y \, dx \, dy \, dz; \\ m_z = \iiint \rho z \, dx \, dy \, dz. \quad (55)$$

Если предположить количества (55) разложенными в ряд Фурье в форме:

$$m_x = C t + \sum_i m_x^i \cos(2\pi \nu_i t + \varepsilon_i), \quad (56)$$

энергия, испускаемая в секунду при излучении частоты  $\nu_i$ , электрические колебания которого параллельны оси  $x$ , равна

$$\frac{64}{3} \frac{\pi^4}{c^3} \nu_i^4 (m_x^i)^2.$$

Таким образом, знание электрического момента распределения, позволяет предвидеть частоту, поляризацию и интенсивность происходящего излучения.

По классическим воззрениям, излучение происходит непрерывно и излучаемая энергия заимствуется у движения электрического потока, движения, которое, следовательно, угасает. В квантовой теории это положение вещей совершенно иное. Излучение происходит в форме кванта  $h\nu$  во время перехода из одного квантованного состояния в другое. Чтобы выразить интенсивность радиации совокупности излучающих атомов, нужно рассуждать статистически, то-есть: если  $N_n$  есть число атомов в состоянии с энергией  $E_n$ , есть определенная вероятность  $P_{nm} dt$ , что один из этих атомов переходит в состояние с энергией  $E_m$  за время  $dt$  и излучаемая за секунду энергия будет

(предполагая  $N_n$  достаточно большим, чтобы пренебречь его убыванием):

$$N_n P_{nm} (E_n - E_m) = N_n P_{nm} h \nu_{nm}. \quad (57)$$

Задача заключается в том, чтобы выразить  $P_{nm}$ . Для этого Бор исходил из очень удачной идеи о соответствии. Он принял, что для очень близких стационарных состояний, которые соответствуют большим значениям квантовых чисел, должны быть асимптотически верны классические законы, и таким образом ему удалось сформулировать некоторые правила для предвидения интенсивности и поляризации. Развитие новой механики позволило уточнить правила, предсказанные Бором.

Чтобы объяснить, как удалось прийти к новым правилам нахождения интенсивности и поляризации, мы начнем рассуждать, как это делал сначала Шредингер. Возьмем атомную систему с одним электроном, волновая функция которой пусть

$$\Psi = \sum_u c_n a_n(x, y, z) e^{\frac{2\pi i}{h} E_n t}. \quad (58)$$

Мы видели, что с ней можно связать среднее распределение электричества, определяемое плотностью  $\delta = -e \Psi \Psi^*$ . Соответствующий электрический момент есть

$$m_x = -e \iiint x \Psi \Psi^* d\tau = \\ = \text{const} \cdot \sum_{nm} (-e) c_n c_m^* \iiint x a_n a_m^* d\tau e^{\frac{2\pi i}{h} (E_n - E_m) t} \quad (59)$$

и т. д. Следовательно интеграл, который фигурирует в последнем члене (59), есть матричный элемент с индексами  $m n$  оператора  $x$  в системе  $a_i$ . Если мы обозначим его через  $X_{mn}$ , мы можем (59) написать в виде

$$m_x = \text{const} \cdot 2 \sum_{n, m}^{n \neq m} (-e) \cdot |c_n| \cdot |c_m| \cdot |X_{mn}| \cdot \\ \cdot \cos 2\pi \left[ \frac{E_n - E_m}{h} t + \varphi_m - \varphi_n \right]. \quad (60)$$

Частоты, которые появляются при разложении (60), в точности представляют частоты  $\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h}$  Бора. В таком случае вполне естественно предположить, что совокупность атомов, находясь в состоянии, определяемом волновой функцией (58), излучает линию частоты  $\nu_{mn}$  с интенсивностью, пропорциональной  $\nu_{mn}^4 |X_{mn}|^2$ .

Но, как мы видели, тот факт, что радиация испускается квантами, связанными с переходами между стационарными состоя-

ниями, обязывает нас отмежеваться от классического представления электрического распределения с плотностью  $e\Psi\Psi^*$ , которая будет излучать одновременно и непрерывно все частоты Бора. Мы принуждены, согласно самому смыслу новой механики, принять чисто статистическую формулировку. Вот формулировка которую мы должны принять, чтобы избежать всяких противоречий: „Пусть имеем совокупность идентичных атомов, для которых имеются собственные функции  $a_n$  гамильтоновского оператора и, следовательно, матричные элементы формы

$$X_{mn} = \int a_m^* x \cdot a_n dt.$$

Предположим, что в этой совокупности было  $N_n$  атомов в состоянии с энергией  $E_n$ . Количество энергии, испускаемое совокупностью атомов в секунду в форме излучения частоты  $\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h}$ , имеющей электрические колебания параллельно оси  $x$ , равно

$$N_n \frac{64 \pi^4}{3c^3} \nu_{nm}^4 |X_{mn}|^2.$$

Сравнивая с (57), мы видим, что вероятность  $[P_{nm}]_x$  переходов, обуславливающих рассматриваемое излучение, дается:

$$[P_{nm}]_x = \frac{64 \pi^4}{3c^3} \frac{\nu_{nm}^3}{h} |X_{mn}|^2 \quad (61)$$

Таким образом, это вероятность перехода за единицу времени для атома из состояния  $E_n$  в состояние  $E_m$  с излучением, колебания которого предполагаются параллельными оси  $x$ . В том случае, когда для обоих состояний  $E_n$  и  $E_m$  все три вероятности  $[P_{nm}]_x$ ,  $[P_{nm}]_y$  и  $[P_{nm}]_z$  одновременно равны нулю, испускания радиации частоты  $\nu_{nm}$  фактически не происходит. Доказано, что это справедливо для всех переходов, которые не удовлетворяют одновременно соотношениям

$$\delta l = \pm 1 \quad \delta m = \begin{cases} 0 \\ \pm 1 \end{cases} \quad (62)$$

Таким образом, волновая механика позволяет доказать правила отбора для квантовых чисел  $l$  и  $m$ . Вполне понятно, она не может доказать третьего правила отбора  $\delta j = \begin{cases} 0 \\ \pm 1 \end{cases}$ , которое мы уже встречали, поскольку она пренебрегает числом  $j$ . Мы увидим, что теория Дирака позволяет найти совокупность всех трех правил отбора.

ЧАСТЬ ВТОРАЯ  
ТЕОРИЯ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ЭЛЕКТРОНА  
ДИРАКА. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ

---

Глава IX

Теория Паули

1. Вращение электрона и поляризация света

Мы уже видели, что волновая механика в ее первоначальной форме не разрешила ни одной из трудностей и что это привело к утверждению существования у электронов собственного магнетизма. Таким образом, стало очевидным, что волновая механика оставалась неполной, поскольку она не содержала ни одного элемента, соответствующего этому собственному магнетизму. Но идея магнитного вращающегося электрона не может развиться в новой теории так же легко, как в прежних. Оставаясь в рамках классических концепций, Уленбек и Гаудсмит представляли электрон, как небольшой шар отрицательного электричества во вращении, с вращательным моментом, равным  $\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$  и магнитным моментом вдоль той же самой оси, равным магнетону Бора  $\frac{e\hbar}{4\pi m_0 c}$ . Но в волновой механике оказывается невозможным такое представление и всегда приходится вводить термин вероятностей.

Чтобы представить себе, каким образом должна ставиться проблема, нужно рассуждать так, как это делается при определении поляризации кванта света. Рассмотрим пучек света, поляризованного прямолинейно, который распространяется в направлении  $oz$ .

Пусть  $ox$  и  $oy$  две оси перпендикулярные  $oz$ . Световой вектор, нормальный к  $oz$ , имеет форму:

$$\vec{a}_0 \sin 2\pi \nu \left( t - \frac{z}{c} + \varphi \right)$$

и он имеет составляющие  $ox$  и  $oy$ , амплитуды которых даны формулами:

$$a_x = a_0 \cos \theta, \quad a_y = a_0 \sin \theta \quad (1)$$

если мы назовем  $\theta$  угол этого вектора с  $ox$ . Интенсивность пучка есть  $a_0^2$ . Если мы поместим на траектории пучка николю, который пропускает только колебания, параллельные  $ox$ , вектор света за николем сводится к  $a_x \sin 2\pi \nu \left( t - \frac{z}{c} + \varphi \right)$ , а интенсив-

ность есть  $a_0^2 \cos^2 \theta$ . Если затем мы повернем николю на  $90^\circ$ , световой вектор в колебании за николем параллелен  $ou$  и равен

$$a_y \sin 2\pi v \left( t - \frac{z}{c} + \varphi \right);$$

а интенсивность есть  $a_0^2 \sin^2 \theta$ . Как же нужно объяснить все это, если принять существование фотонов? Если мы припишем поляризацию каждому фотону отдельно, то причинное описание феномена становится невозможным. Действительно, так как в некотором смысле невозможно приписать первоначальному фотону поляризацию, определяемую световым вектором первоначальной волны, мы не видим, каким образом можно объяснить, почему некоторые фотоны не проходят через николю, в то время как другие его проходят, принимая поляризацию, направленную, например, по  $ox$ . Принимая точку зрения новой механики, мы должны считать, что первоначальному фотону нельзя приписывать определенной поляризации, а что нужно только определить с помощью световой волны вероятность, что фотон, проходя николю, оказывается имеющим поляризацию параллельно  $ox$ : эта вероятность есть  $\cos^2 \theta$ . Можно сказать, что фотон перед прохождением николя имеет вероятность  $\cos^2 \theta$  оказаться поляризованным параллельно  $ox$  и вероятность  $\sin^2 \theta$  оказаться поляризованным параллельно  $ou$ .

Вернемся теперь к спину электрона. Гипотеза магнитного вращающегося электрона приводит к приписыванию электронам двух величин, направленных параллельно друг другу, — собственного магнитного момента и собственного момента вращения. В то время как для фотона поляризация определяется направлением, лишенным знака, вектор спина для электрона имеет направление и знак. Но еще в меньшей мере, чем приписать фотону определенную поляризацию, в теории магнитного электрона, соответствующей общим принципам новой механики, мы не должны приписывать отдельному электрону определенного спина. Единственная вещь, о которой мы можем говорить, это вероятность, что опыт, позволяющий определить направление спина электрона, дает тот или иной результат. Именно на этой существенной идее Паули и основал первую попытку создать теорию магнитного электрона в рамках волновой механики. Мы должны несколько остановиться на этой попытке, поскольку она привела Дирака к развитию его более полной теории.

## 2. Теория Паули

Паули<sup>1)</sup> сделал первую попытку четко поставить проблему магнитного электрона в рамках общих понятий новой механики. Если мы рассмотрим систему прямоугольных осей, всякий

<sup>1)</sup> Zeitschrift für Physik, 43 (1927), стр. 601.

опыт, позволяющий приписать некоторое значение составляющей собственного момента вращения электрона вдоль  $oz$ , даст в результате согласно концепций Уленбека и Гаудсмита или  $+\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$  или  $-\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$ . Тогда вполне естественно предположить, что мы должны приписать электрону не одну функцию  $\Psi$ , а две функции  $\Psi_1(xyzt)$  и  $\Psi_2(xyzt)$ , таким образом, что  $|\Psi_1|^2 dx dy dz$  измеряет вероятность, что в момент  $t$  координаты электрона будут заключаться в интервале  $dx dy dz$  и что составляющая  $z$  его момента вращения будет  $+\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$ , тогда как  $|\Psi_2|^2 dx dy dz$  измеряет вероятность, что в момент  $t$  координаты будут заключаться в интервале  $dx dy dz$ , причем составляющая  $z$  момента вращения будет  $-\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$ . Таким образом Паули ввел идею, что для учета магнетизма электрона нужно увеличить число функций  $\Psi$ . Естественно, условием нормировки здесь будет:

$$\iiint [|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2] dx dy dz = 1 \quad (2)$$

Паули отыскал уравнения распространения, определяя две функции  $\Psi$ . Для этого он попрежнему исходил из гамильтоновской функции, но учитывал магнитный момент электрона.

Если мы обозначим через  $s_x s_y s_z$  составляющие единичного вектора  $\vec{s}$  в направлении спина электрона, магнитный момент есть

$$\frac{eh}{4\pi m_0 c} \cdot \vec{s}$$

Тогда гамильтонова функция в постоянном поле будет формы  $H(x, y, z, p_x, p_y, p_z, s_x, s_y, s_z)$  и количества  $s_x s_y s_z$ , как это легко видеть, будут фигурировать там линейно. Теперь метод, который позволяет волновой механике получить уравнение распространения, заключается в том, чтобы заместить  $p_x p_y p_z$  на операторы  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$  и т. д. и написать:

$$H\left(x, y, z, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}, s_x, s_y, s_z\right) \Psi = E \Psi \quad (3)$$

для монохроматических волн частоты  $\frac{E}{h}$ . Но нам нужны два уравнения для двух  $\Psi$ . Руководствуясь общими соображениями, которые я обхожу молчанием, Паули предложил заместить составляющие  $s_x, s_y$  и  $s_z$  соответственно тремя эрмитовыми матрицами из двух строк и двух столбцов:



$$\mathbf{s}_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{s}_2 = \begin{vmatrix} 0 & i \\ +i & 0 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{s}_3 = \begin{vmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (4)$$

Здесь более подходит следующее определение: если  $A$  есть матрица из двух строк и двух столбцов, операция  $A\Psi$  определяется соотношением:

$$A\Psi_i = \sum_k^2 a_{ik} \Psi_k \quad (i, k = 1, 2) \quad (5)$$

естественное обобщение формул, которые мы уже встречали в отношении матриц. В частности, применение соотношения (5) к матрицам  $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3$  дает:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1 \Psi_1 &= \Psi_2; & \mathbf{s}_1 \Psi_2 &= \Psi_1; & \mathbf{s}_2 \Psi_1 &= -i \Psi_2; & \mathbf{s}_2 \Psi_2 &= i \Psi_1; \\ \mathbf{s}_3 \Psi_1 &= \Psi_1; & \mathbf{s}_3 \Psi_2 &= -\Psi_2. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, Паули замещает уравнение (3) двумя уравнениями:

$$\begin{aligned} H\left(x, y, z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3\right) \Psi_1 &= E \Psi_1 \\ H\left(x, y, z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3\right) \Psi_2 &= E \Psi_2 \end{aligned} \quad (7)$$

Это два уравнения, которым должны удовлетворять функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ .

Но изложенная выше теория заставляет играть особую роль ось  $oz$ , потому что волновые функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  дают вероятности двух значений, возможных для составляющей спина, параллельной  $oz$ . Если мы хотим получить вероятности, чтобы составляющая момента вращения, параллельная какой-нибудь другой оси  $OZ$ , оказалась равной  $\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{2\pi}$  или  $-\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{2\pi}$ , нужно брать другую систему прямоугольных осей  $OXYZ$ , в которых  $OZ$  будет третьей осью, и вычислить в этой системе две волновые функции  $\Phi_1(X, Y, Z)$  и  $\Phi_2(X, Y, Z)$ , квадраты модулей которых дадут искомые вероятности и, естественно, поскольку система осей  $OXYZ$  физически ничем не отличается от системы  $oxuz$ , функции  $\Phi$  должны подчиняться следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} H\left(X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3\right) \Phi_1 &= E \Phi_1 \\ H\left(X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3\right) \Phi_2 &= E \Phi_2 \end{aligned} \quad (8)$$

Положение осей OXYZ по отношению осей  $oxuz$  может быть определено следующим образом. Заменим  $x, y, z, X, Y, Z$  на  $x_1, x_2, x_3, X_1, X_2, X_3$  и мы имеем формулы преобразования в виде:

$$X_i = \sum O_{ij} x_j \quad (9)$$

причем  $O_{ij}$  — элементы действительной и ортогональной матрицы ( $\sum_i O_{ij} O_{ik} = \delta_{jk}$ ). В общем матрица  $O$  определяет переход первой системы осей во вторую. Если матрица известна, то как можно выразить функции  $\Phi$  с помощью функции  $\Psi$ ? Такой вопрос поставил себе Паули и разрешил его. Если мы будем исходить из уравнений (7) и если заменим  $xuz$ , как функции от XYZ, посредством формул обратных (9), мы получаем, как мы это докажем несколько позднее для частного случая, уравнения:

$$\begin{aligned} H \left( X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, \right. \\ \left. -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, S_1, S_2, S_3 \right) \Psi_1(X, Y, Z) = E \Psi_1(X, Y, Z) \quad (10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H \left( X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, \right. \\ \left. -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, S_1, S_2, S_3 \right) \Psi_2(X, Y, Z) = E \Psi_2(X, Y, Z). \end{aligned}$$

Оператор  $H$  уравнений (10) определяется следующим образом: пишут классическую функцию Гамильтона

$$H(X, Y, Z, p_x, p_y, p_z, s_x, s_y, s_z)$$

в системе XYZ, функцию, в которой фигурируют составляющие  $s_x, s_y$  и  $s_z$  единичного вектора, направленного соответственно собственному магнитному моменту электрона; затем в этом выражении заменяют, с одной стороны,  $p_x p_y p_z$  на  $-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}$  и т. д., а с другой стороны,  $s_x s_y s_z$  на эрмитовы матрицы  $S_1, S_2$  и  $S_3$ , определяемые соотношениями:

$$S_i = \sum_j O_{ij} s_j \quad (11)$$

исходя из  $s$ , определяемых (4). Таким образом, в полученном операторе  $H S_i$  всегда фигурируют линейно. Наконец, в формулах (10) функции  $\Psi_1(X, Y, Z)$  и  $\Psi_2(X, Y, Z)$  получаются из  $\Psi_1(x, y, z)$  и  $\Psi_2(x, y, z)$ , замещая  $xuz$  на их выражения через  $X, Y, Z$ .

Паули далее показал, и мы позднее увидим аналогичное доказательство в теории Дирака<sup>1)</sup>, что всегда существует унитар-

<sup>1)</sup> См. главу XI, параграф 2.

ная матрица  $\Lambda$  с двумя строками и двумя столбцами, такая, что

$$S_i = \Lambda^{-1} \mathbf{s}_i \Lambda \quad (\Lambda^{-1} = \Lambda^+) \quad i = 1, 2, 3 \quad (12)$$

Иначе говоря, существует каноническое преобразование, обуславливающее переход каждой из  $\mathbf{s}_i$  в соответствующую  $S_i$ . Матрице  $\Lambda$  соответствует операция, определяемая формулой (5), и, применяя это действие к двум членам уравнения (10), мы получаем

$$\begin{aligned} \Lambda H \left( X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, \right. \\ \left. -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, S_1, S_2, S_3 \right) \Psi_1 = E \Lambda \Psi_1 \\ \Lambda H \left( X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, \right. \\ \left. -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, S_1, S_2, S_3 \right) \Psi_2 = E \Lambda \Psi_2 \end{aligned} \quad (13)$$

причем  $\Psi$  выражено через  $XYZ$ . Поскольку  $S_i$  фигурируют в  $H$  линейно,  $\Lambda H$  содержит линейно выражения  $\Lambda S_i$ , равные по (12)  $\mathbf{s}_i \Lambda$ ; поскольку, далее,  $\Lambda$  коммутирует с  $X$ ,  $\frac{\partial}{\partial X}$  и т. д., мы имеем:

$$\begin{aligned} \Lambda H(\dots) \Psi_1 = H \left( X, Y, Z, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial X}, -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y}, \right. \\ \left. -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Z}, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3 \right) \Lambda \Psi_1 = E \Lambda \Psi_1 \end{aligned} \quad (14)$$

и аналогичное уравнение для  $\Psi_2$ . Сравнивая с (8), мы видим, что:

$$\Phi_1(X, Y, Z) = \Lambda \Psi_1(X, Y, Z); \quad \Phi_2(X, Y, Z) = \Lambda \Psi_2(X, Y, Z). \quad (15)$$

Эти формулы (15) показывают нам, как волновые функции  $\Phi$  выводятся из волновых функций  $\Psi$ , ибо в каждом отдельном случае при известной матрице  $O$  можно найти матрицу  $\Lambda$ . В следующем параграфе мы дадим этому конкретный пример.

Вполне понятно, что при унитарной  $\Lambda$  сумма  $|\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2$  равна  $|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$ , а это выражает тот факт, что полная вероятность обеих возможностей для направления момента вращения всегда есть единица.

### 3. Пример применения предыдущей теории

Чтобы иллюстрировать теорию предыдущего параграфа, полезно рассмотреть очень простой пример, развитый самим Паули: пример покоящегося электрона в магнитном поле  $\vec{H}$ . Возьмем

систему осей  $oxyz$  такую, чтобы положительное направление  $oz$  совпадало с направлением  $\vec{H}$ . Тогда мы имеем  $H_x = H_y = 0$ ,  $H_z = H$ . При введении магнетона Бора  $\mu_0 = \frac{eh}{4\pi m_0 c}$  гамильтонова функция <sup>1)</sup> примет вид  $\mu_0 s_z H$ , и мы имеем для уравнений (7):

$$\mu_0 s_3 H \Psi_1 = E \Psi_1 \quad \mu_0 s_3 H \Psi_2 = E \Psi_2 \quad (16)$$

или по (6):

$$\mu_0 H \Psi_1 = E \Psi_1 \quad -\mu_0 H \Psi_2 = E \Psi_2 \quad (16_{\text{бис}})$$

Эта система имеет решение только для  $E = \pm \mu_0 H$ . Поскольку  $|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 = 1$ , мы имеем:

$$\begin{aligned} \text{для } E = \mu_0 H: \quad \Psi_1 = e^{i\gamma} \Psi_2 = 0 \\ \text{для } E = -\mu_0 H: \quad \Psi_1 = 0 \quad \Psi_2 = e^{i\delta}. \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом, для  $E = \mu_0 H$  магнитная ось электрона определенно направлена к положительным  $Z$ , а для  $E = -\mu_0 H$  она определенно направлена к отрицательным  $Z$ . Это результаты, которых и следовало ожидать.

Возьмем теперь вторую систему осей  $OXYZ$  такую, чтобы ось  $OZ$  с полем  $\vec{H}$  образовывала угол  $\theta$ . Тогда классическая гамильтонова функция есть

$$\mu_0 (\vec{s} \cdot \vec{H}) = \mu_0 (s_x H_x + s_y H_y + s_z H_z)$$

и волновые функции  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  суть решения, по (8), уравнений:

$$\begin{aligned} \mu_0 [H_x s_1 + H_y s_2 + H_z s_3] \Phi_1 = E \Phi_1, \\ \mu_0 [H_x s_1 + H_y s_2 + H_z s_3] \Phi = E \Phi_2, \end{aligned} \quad (18)$$

а это дает:

$$\begin{aligned} \mu_0 [(H_x - i H_y) \Phi_2 + H_z \Phi_1] = E \Phi_1; \\ \mu_0 [(H_x - i H_y) \Phi_1 - H_z \Phi_2] = E \Phi_2 \end{aligned} \quad (19)$$

Для того, чтобы эти два уравнения, однородные по  $\Phi_i$ , были совместимы, нужно, чтобы:

$$\begin{vmatrix} \mu_0 H_z - E & \mu_0 (H_x - i H_y) \\ \mu_0 (H_y + i H_x) & -\mu_0 H_z - E \end{vmatrix} = 0 \quad (20)$$

то-есть

$$E = \pm \mu_0 \sqrt{H_x^2 + H_y^2 + H_z^2} = \pm \mu_0 H. \quad (21)$$

Следовательно, здесь нужно различать два случая:

*Первый случай:*  $E = \mu_0 H$ .

Тогда мы имеем:

$$\frac{\Phi_2}{\Phi_1} = \frac{H - H_z}{H_x - i H_y} = \frac{H - H_z}{H_x^2 + H_y^2} (H_x - i H_y) = \frac{H - H_z}{H_p^2} \cdot H_p e^{i\alpha} \quad (22)$$

<sup>1)</sup> В этом параграфе буква  $H$  больше уже не обозначает гамильтонова оператора, а величину магнитного поля.

полагая  $\alpha = \text{arc tg } \frac{H_Y}{H_X}$  и обозначая через  $H_p$  составляющую  $\vec{H}$ , нормальную к  $OZ$ . Следовательно, мы имеем также:

$$\frac{\Phi_2}{\Phi_1} = \frac{H(1 - \cos \theta)}{H \sin \theta} e^{i\alpha} = \text{tg } \frac{\theta}{2} \cdot e^{i\alpha} \quad (23)$$

Поскольку  $|\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2 = 1$ , мы должны иметь:

$$|\Phi_1|^2 = \frac{1}{1 + \text{tg}^2 \frac{\theta}{2}} = \cos^2 \frac{\theta}{2}; \quad |\Phi_2|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (24)$$

Так как аргументы произвольны, мы можем положить:

$$\Phi_1 = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\alpha - \frac{\pi}{2}}{2}}; \quad \Phi_2 = i \sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\alpha - \frac{\pi}{2}}{2}}. \quad (25)$$

*Второй случай:*  $E = -\mu_0 H$ .

Тогда мы имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi_2}{\Phi_1} &= \frac{H + H_X}{H_X - i H_Y} = \\ &= \frac{H + H_X}{H_p} \cdot e^{i\alpha} = \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} e^{i\alpha} = \text{ctg } \frac{\theta}{2} e^{i\alpha} \end{aligned} \quad (26)$$

и затем:

$$|\Phi_1|^2 = \frac{1}{1 + \text{ctg}^2 \frac{\theta}{2}} = \sin^2 \frac{\theta}{2}; \quad |\Phi_2|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (27)$$

а это позволяет положить

$$\Phi_1 = i \sin \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\alpha - \frac{\pi}{2}}{2}}; \quad \Phi_2 = \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\alpha - \frac{\pi}{2}}{2}}. \quad (28)$$

Полученные таким образом результаты означают, например, если первый опыт нам показывает, что магнитный момент электрона направлен по полю так, что энергия есть  $\mu_0 H$ , то вероятность, что при втором опыте магнитный момент окажется направленным по  $OZ$ , есть  $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ .

В разобранным здесь простом примере легко вычислить унитарные матрицы  $\Lambda$  Паули. Сравним функции  $\Psi$  (17) (беря здесь

для упрощения нули для произвольных аргументов  $\gamma$  и  $\delta$ ) с функциями  $\Phi$  (25) и (28). Мы видим, что унитарная матрица  $\Lambda$  равна:

$$\Lambda = \begin{vmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i \frac{\alpha - \pi}{2}} & i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i \frac{\alpha - \pi}{2}} \\ i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\alpha - \pi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\alpha - \pi}{2}} \end{vmatrix} \quad (29)$$

Элементы  $\Lambda_{ij}$ , которые представляют частные случаи параметров Кейли-Клейна, удовлетворяют соотношению:

$$\Lambda_{11} \Lambda_{22} - \Lambda_{12} \Lambda_{21} = 1. \quad (30)$$

Мы легко находим

$$\Lambda^+ = \begin{vmatrix} \Lambda_{22} & -\Lambda_{12} \\ -\Lambda_{21} & \Lambda_{11} \end{vmatrix} \quad (31)$$

откуда выводим

$$\Lambda \Lambda^+ = \begin{vmatrix} \Lambda_{22} \Lambda_{11} - \Lambda_{12} \Lambda_{21} & -\Lambda_{11} \Lambda_{12} + \Lambda_{12} \Lambda_{11} \\ \Lambda_{21} \Lambda_{12} - \Lambda_{22} \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \Lambda_{11} - \Lambda_{12} \Lambda_{21} \end{vmatrix} = 1. \quad (32)$$

следовательно  $\Lambda$  унитарна. Форма  $\Lambda$ , кроме того, может быть предвидена на основании рассуждений Паули.

#### 4. Недостаточность теории Паули

Мы дали только схему теории Паули; в действительности эта теория совершенно недостаточна. Кроме того, она не согласуется с теорией относительности: она предусматривает только изменения пространственных координат и не предусматривает преобразований пространственно-временных координат в релятивистском смысле. Кроме того, она не дает возможности правильно предвидеть водородный спектр.

В силу этих соображений мы ее больше рассматривать не будем, но мы должны заметить, что она ввела следующие существенные идеи:

1. Магнетизм электрона соответствует существованию нескольких функций  $\Psi$ .

2. Волновые функции  $\Psi$  должны позволить определить вероятность возможных ориентаций спина в определенном направлении.

3. Меняя оси координат, можно сохранить волновые уравнения той же самой формы, но тогда волновые функции преобразуются известным образом, определяемым матрицей  $\Lambda$ .

Дарвин<sup>1)</sup> сделал другую попытку ввести магнетизм электрона в волновую механику способом, вполне соответствующим принципу относительности: он пытался определить четыре функции  $\Psi$ , которые будут составляющими пространственно-временного вектора. Попытка его не удалась и он затем сам присоединился к теории Дирака, где точно также фигурируют четыре функции  $\Psi$ , но они не являются составляющими пространственно-временного вектора.

---

<sup>1)</sup> *Proceedings of the Royal Society, A*, 116 (1927) стр. 227.

## Глава X

# Теория Дирака

### 1. Обзор прежних результатов

Для того, чтобы ввести в уравнения волновой механики идею собственного магнетизма и вращения электрона, Дирак исходил из более общих соображений, чем Паули. Он принял, что уравнения волновой механики должны быть согласованы с принципом относительности, но он возражал против того способа, каким это делалось. Чтобы понять его возражения, вспомним сначала вкратце, как мы писали уравнения волновой механики с одной функцией  $\Psi$ .

Общее волновое уравнение для частицы в нерелятивистской волновой механике есть:

$$H\left(x, y, z, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}, t\right) \Psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1)$$

причем  $H$ —гамильтоновский оператор. В случае частицы массы  $m$ , движущейся в поле, характеризуемом потенциалом  $U(x, y, z, t)$ , мы имеем:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta \Psi + U(x, y, z, t) \Psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2)$$

Если частица имеет заряд  $\epsilon$  и движется в электростатическом поле с электрическим потенциалом  $V(x, y, z, t)$ , мы имеем  $U = \epsilon V$  и (2) примет вид:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta \Psi + \epsilon V(x, y, z, t) \Psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3)$$

В частности, если заряженная частица есть электрон, нужно положить в (3):  $\epsilon = -e$ .

Мы уже видели, что в этой нерелятивистской теории всегда положительная величина  $\Psi\Psi^*$  представляла плотность вероятности и что определенная таким образом полная вероятность (равная единице) сохранялась с течением времени. Количество  $\epsilon\Psi\Psi^*$  (для электрона  $-e\Psi\Psi^*$ ) есть средняя плотность электричества, которая служит для вычисления испускаемого излучения.

Когда хотели построить волновую механику в согласии с принципом относительности, то сейчас же путем вполне естественной индукции получили новое волновое уравнение для замещенной (1). Мы видели, что это новое уравнение для частицы массы  $m$  и заряда  $\epsilon$ , перемещающейся в электромагнитном поле,



определяемом скалярным потенциалом  $V(x,y,z,t)$  и векторным потенциалом  $\vec{A}(x,y,z,t)$ , принимает вид:

$$\frac{1}{c^2} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} - eV \right)^2 \Psi - \sum_{xyz} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right)^2 \Psi = m_0^2 c^2 \Psi \quad (4)$$

Для электрона уравнение (4) принимает вид:

$$\frac{1}{c^2} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + eV \right)^2 \Psi - \sum_{xyz} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right)^2 \Psi = m_0^2 c^2 \Psi. \quad (5)$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} P_1 &= -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eA_x}{c}; & P_2 &= -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{eA_y}{c}; \\ P_3 &= -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{eA_z}{c}; & P_4 &= +\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{eV}{c} \end{aligned} \quad (6)$$

Они позволяют нам заменить уравнение (5) на:

$$\left( P_4^2 - \sum_1^3 P_i^2 - m_0^2 c^2 \right) \Psi = 0 \quad (7)$$

Релятивистские волновые уравнения (4)-(7), как мы это видели, не позволяют нам более брать за плотность вероятности количество  $\Psi\Psi^*$ , так как интеграл этого количества по всему пространству не является обязательно постоянным во времени. Мы должны принять за плотность вероятности выражение более сложное, которое в случае электрона ( $\epsilon = -e$ ) принимает вид:

$$\rho = \frac{-\hbar}{4\pi m_0 c^2} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) + \frac{e}{m_0 c^2} V \Psi \Psi^* \quad (8)$$

выражение, которое приводится к  $\Psi\Psi^*$ , когда достаточно ньютоново приближение. Средняя плотность электричества здесь есть  $\rho_e = -e\rho$  со значением (8) для  $\rho$ .

## 2. Критические замечания Дирака в отношении уравнений (4)-(8)

Дирак подверг основательной критике теорию релятивистской волновой механики, которую мы сейчас изложим. Он в особенности возражал против выражения (8) плотности вероятности; так как это выражение обуславливается самой формой уравнения распространения (7), это является возражением против самого этого уравнения.

Резюмируем аргументы Дирака. Первое возражение, которое можно высказать в отношении выражения (8) для  $\rho$ , это то, что оно не обязательно положительно, тогда как отрицательное значение  $\rho$  не может, очевидно, иметь никакого смысла. Второе возражение, уже высказанное в конце главы VII, заключается

в следующем: какая бы ни была форма принятого волнового уравнения, общие принципы новой механики требуют, чтобы вероятность отыскания, для координат частицы, значений, заключающихся в интервалах  $x \rightarrow x + dx$ ,  $y \rightarrow y + dy$ ,  $z \rightarrow z + dz$ , была  $\Psi\Psi^* dx dy dz$ , а это требование не совпадает с формулой (8).

При наличии этих трудностей Дирак утверждает, что плотность вероятности должна непременно иметь всегда форму  $\Psi\Psi^*$  или, если мы вместе с Паули примем существование нескольких волновых функций  $\Psi_i$ , форму точно также всегда положительную  $\sum_i \Psi_i \Psi_i^*$ . Но, принимая этот постулат, мы

приходим к заключению большой важности: волновое уравнение или уравнения действительной релятивистской волновой механики должны быть первого порядка по отношению к четырем переменным  $x y z t$ . Изложим теперь его рассуждение.

Нерелятивистское уравнение (1) есть первого порядка по отношению ко времени и соответствующее выражение плотности вероятности есть  $\Psi\Psi^*$ . Если мы зададимся первоначальной формой  $\Psi$  (*хузо*) волновой функции, она целиком определится волновым уравнением, и тогда можно сказать, что, если мы зададимся первоначальной  $\Psi\Psi^*$ , последующее изменение плотности определено: следовательно, подразумевается, что сохранение вероятности (и электричества) будет тогда необходимым следствием самого волнового уравнения, как мы это уже доказали. В случае релятивистского уравнения (4), этого конечно нет; так как это уравнение второго порядка по отношению к  $t$ , то для того, чтобы была определена волновая функция, действительно нужно задаться величинами  $\Psi$  и  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$  в первоначальный момент.

Тогда придется для плотности вероятности принять выражение (8), если мы хотим, чтобы из волнового уравнения следовало сохранение вероятности. Но примем теперь вместе с Дираком постулат, что плотность вероятности обязательно имеет форму  $\Psi\Psi^*$  или  $\sum_i \Psi_i \Psi_i^*$ . Мы увидим, что тогда уравнение (или волно-

вые уравнения) должно быть первого порядка по отношению к  $t$  и что, следовательно, уравнение (4) не может быть точным.

Действительно, если волновое уравнение есть второго порядка по отношению к  $t$ , его решение определяется только в том случае, если мы зададимся первоначальными значениями  $\Psi$  и  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

Предположим, что мы задались только начальной  $\Psi$ , а не  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

В гипотезе Дирака первоначальная плотность будет, таким образом, известна, так как она зависит только от  $\Psi$ , а последующее изменение этой плотности не будет определено, поскольку не будет определено изменение функции  $\Psi$ . Задаваясь произволь-

ной первоначальной формой  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ , можно, исходя из известной первоначальной формы плотности, иметь какое угодно последующее изменение для этой плотности, и тогда не будет автоматического сохранения вероятности. Таким образом, Дирак пришел к выводу, что волновое уравнение должно быть первого порядка по отношению к  $t$  и, так как принцип относительности всегда заставляет координаты пространства и времени играть симметричную роль, оно должно быть первого порядка по отношению к четырем переменным  $x, y, z, t$ . То же самое рассуждение и то же самое заключение действительны в том случае, если имеется несколько функций  $\Psi$  и несколько волновых уравнений.

Следовательно, Дираку пришлось отыскивать одно или несколько уравнений первого порядка в отношении переменных  $x, y, z, t$ , чтобы заменить уравнение (4). Посмотрим, как это удалось ему сделать.

### 3. Уравнение Дирака в отсутствии поля

Чтобы установить новое уравнение, Дирак начал со случая свободного движения электрона в отсутствии всякого электромагнитного поля.

Тогда мы имеем  $V = \vec{A} = 0$  и операторы  $P_i$  [формулы (6)] становятся:

$$p_1 = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad p_2 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}; \quad p_3 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}; \quad p_4 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad (9)$$

В этом простом случае можно с уверенностью принять, что функция  $\Psi$  удовлетворяет уравнению:

$$\Delta \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{4\pi^2}{h^2} m_0^2 c^2 \Psi \quad \text{или} \quad \left( p_4^2 - \sum_1^3 p_i^2 - m_0^2 c^2 \right) \Psi = 0 \quad (10)$$

ибо в этом случае из основных соображений, из которых исходит волновая механика, получается, что плоская монохроматическая волна частоты  $\frac{W}{h} = \frac{m_0 c^2}{h \sqrt{1-\beta^2}}$  и длины  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h \sqrt{1-\beta^2}}{m_0 v}$

должна быть решением, и без труда можно доказать, что то же самое справедливо в отношении уравнения (10).

Но уравнение (10) есть второго порядка, а нам нужны уравнения первого порядка. Чтобы их получить, Дирак полагает,

что существует несколько волновых функций  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$  и что каждая из них удовлетворяет уравнению:

$$\left( p_4^2 - \sum_1^3 p_i^2 - m_0^2 c^2 \right) \Psi_\kappa = 0 \quad (\kappa = 1, \dots, N) \quad (11)$$

но эти уравнения второго порядка должны быть *следствиями* действительных волновых уравнений, которые суть первого порядка.

Эти действительные волновые уравнения первого порядка Дирак пишет в символической форме:

$$(p_4 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \alpha_4 m_0 c) \Psi = 0 \quad (12)$$

Символическое уравнение (12) означает, что для каждой  $\Psi_\kappa$  мы имеем:

$$\left( p_4 + \sum_1^3 \alpha_i p_i + \alpha_4 m_0 c \right) \Psi_\kappa = 0. \quad (13)$$

$\alpha_i$  суть матрицы с  $N$  строками и  $N$  столбцами и операция  $\alpha_i \Psi_\kappa$ , как мы это уже делали при изучении теории Паули, определяется по формуле:

$$\alpha_i \Psi_\kappa = \sum_1^N \alpha_{i, \kappa l} \Psi_l \quad (14)$$

где  $\alpha_{i, \kappa l}$  означает элемент с индексами  $\kappa l$  матрицы  $\alpha_i$ .

Но уравнения (13) должны иметь следствием уравнения (11), а это предопределяет известные условия для матриц  $\alpha_i$ . Действительно, применим к уравнению (13) оператор  $p_4 - \sum_1^3 \alpha_i p_i - \alpha_4 m_0 c$ ;

тогда мы находим:

$$\left[ p_4^2 - \left( \sum_1^3 \alpha_i p_i + \alpha_4 m_0 c \right) \right] \Psi = 0 \quad (15)$$

и уравнение (15) совпадет с (11) только в том случае, если мы положим:

$$\alpha_i^2 = 1 \quad \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0 \quad (16)$$

Следовательно, мы должны наложить на матрицы  $\alpha_i$  условия (16). Кроме того, они должны быть так же эрмитовыми, как и все матрицы, которые встречаются в новой механике.

Дирак старался взять как можно меньшее число  $N$  волновых функций. Для  $N < 4$  нельзя найти четырех эрмитовых матриц, удовлетворяющих условиям (16). Наоборот, для  $N = 4$  их

можно найти и тогда удобно будет принять следующие матрицы  $\alpha_i$ :

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ & \alpha_2 & & \\ & & \alpha_3 & \\ & & & \alpha_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Они, очевидно, эрмитовы и, кроме того, их квадраты равны единичной матрице и антикоммутируют между собой, как этого и требуют условия (16).

Короче говоря, вместе с Дираком мы примем существование четырех функций  $\Psi_i$ , которые удовлетворяют четырем уравнениям первого порядка (13). Явно эти четыре уравнения при помощи матриц  $\alpha_i$  (17) изобразятся:

$$\begin{aligned} (p_4 + m_0 c) \Psi_1 + (p_1 + ip_2) \Psi_4 + p_3 \Psi_3 &= 0 \\ (p_1 + m_0 c) \Psi_2 + (p_1 - ip_2) \Psi_3 - p_3 \Psi_4 &= 0 \\ (p_4 - m_0 c) \Psi_3 + (p_1 + ip_2) \Psi_2 + p_3 \Psi_1 &= 0 \\ (p_1 - m_0 c) \Psi_4 + (p_1 - ip_2) \Psi_1 - p_3 \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

Исходя из системы (18), можно видеть, как эта система имеет своим следствием систему второго порядка (11) (с  $N=4$ ).

Для примера применим к первому уравнению (18) оператор  $p_4 - m_0 c$  и к четвертому уравнению (18) оператор  $p_1 + ip_2$ , который коммутирует с предыдущим. Тогда мы получим:

$$\begin{aligned} (p_4^2 - m_0^2 c^2) \Psi_1 + (p_4 - m_0 c)(p_1 + ip_2) \Psi_4 + (p_4 - m_0 c) p_3 \Psi_3 &= 0 \\ (p_1 + ip_2)(p_1 - m_0 c) \Psi_4 + (p_1^2 + p_2^2) \Psi_1 - (p_1 + ip_2) p_3 \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

откуда путем исключения  $\Psi_4$  получается:

$$(p_1^2 - m_0^2 c^2) \Psi_1 - (p_1^2 + p_2^2) \Psi_1 + (p_1 + ip_2) p_3 \Psi_2 + (p_1 - m_0 c) p_3 \Psi_3 = 0. \quad (20)$$

Но, применяя оператор  $p_3$  к третьему уравнению (18), мы находим:

$$p_3(p_4 - m_0 c) \Psi_3 = -p_3(p_1 + ip_2) \Psi_2 - p_3^2 \Psi_1 \quad (21)$$

и, так как  $p_i$  коммутируют между собой, мы получаем, подставляя в (20), уравнение:

$$\left( p_1^2 - \sum_{i=1}^3 p_i^2 - m_0^2 c^2 \right) \Psi_1 = 0 \quad (22)$$

и точно таким же образом мы найдем уравнения второго порядка, относящиеся к трем остальным  $\Psi$ . Таким образом, мы доказали уже наперед известный результат, так как матрицы (17) удовлетворяют условиям (16).

Уравнения (18) Дирака имеют очень асимметричный вид: ось  $z$  и соответствующий оператор  $p_z$ , очевидно, играют в них особую роль.

Следовательно, функции  $\Psi_i$  — решения этих уравнений — тесно связаны с подбором осей, как в теории Паули. Они должны служить для вычисления вероятностей, для которых ось  $z$  играет особую роль. Если мы возьмем другие оси, мы сможем написать волновые уравнения, всегда имеющие форму (18), но они будут иметь своим решением другие функции  $\Psi_i$ , связанные с предыдущими преобразованиями, аналогичными встречавшимся в теории Паули. Мы займемся этим вопросом в следующей главе.

Интересно привести несколько замечаний по поводу перехода прежнего уравнения (10) в уравнения (18). Этот переход несколько аналогичен переходу уравнения световых волн в уравнения Максвелла. Действительно, уравнение распространения световых волн (в пустоте) есть:

$$\Delta u - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (23)$$

Это уравнение второго порядка, где  $u$  обозначает величину, характеризующую световое возмущение. В электромагнитной теории  $u$  может быть какой-нибудь из шести составляющих двух полей (электрического поля и магнитного поля) световой волны. Таким образом, для шести величин  $h_x, h_y, h_z, H_x, H_y$  и  $H_z$  мы имеем шесть уравнений типа (23).

Переход этих уравнений распространения в уравнения Максвелла заключается именно в замещении уравнений второго порядка одновременными уравнениями первого порядка, связывающими шесть величин  $h_x \dots H_z$  таким образом, что шесть уравнений второго порядка типа (23) будут их следствием. Именно этим путем следовал Дирак для перехода от уравнений второго порядка (15) к уравнениям первого порядка (18).

Если бы волна волновой механики была физической реальностью в классическом смысле, следовало бы ожидать, что четыре  $\Psi_i$  образуют четыре составляющие пространственно-временного вектора. Но мы теперь знаем, что волна в волновой механике не представляет собой физической реальности в классическом смысле: это комплексное выражение, служащее только промежуточным звеном для вычисления и позволяющее образовывать определенные действительные в физическом смысле выражения, наподобие плотности вероятности  $\Psi\Psi^*$ . В теории Дирака, таким образом, четыре функции  $\Psi_i$  совершенно не нуждаются в том, чтобы иметь характер составляющих вектора, и мы увидим, что они действительно его не имеют. Но существуют определенные действительные комбинации этих количеств, которые имеют физический смысл (вероятности) и обладают векторным характером. Сейчас мы и перейдем к их изучению.

## 4. Уравнения Дирака в электромагнитном поле

Уравнения (18) подходят только к случаю отсутствия поля. Что же следует брать за уравнения распространения, если электрон движется в поле, определяемом скалярным потенциалом  $V$  и векторным потенциалом  $\vec{A}$ ? Дирак разрешил вопрос, говоря: достаточно в символическом уравнении (12) заместить операторы  $p_i$  формул (9) на операторы  $P_i$  формул (6).

Если принять этот постулат Дирака, волновые уравнения в электромагнитном поле символически изобразятся так:

$$(P_4 + \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + \alpha_3 P_3 + \alpha_4 m_0 c) \Psi = 0 \quad (24)$$

или явно:

$$\begin{aligned} (P_4 + m_0 c) \Psi_1 + (P_1 + iP_2) \Psi_4 + P_3 \Psi_3 &= 0 \\ (P_4 + m_0 c) \Psi_2 + (P_1 - iP_2) \Psi_3 - P_3 \Psi_4 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_3 + (P_1 + iP_2) \Psi_2 + P_3 \Psi_1 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_4 + (P_1 - iP_2) \Psi_1 - P_3 \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Что особенно замечательно, так это то, что эти уравнения, полученные путем общих рассуждений, совершенно независимых от трудностей, упомянутых в первой части настоящей работы, содержат особенности магнитного вращающегося электрона! Для того, чтобы убедиться в этом, мы попытаемся образовать, исходя из уравнений (25), уравнения второго порядка, которые обобщают уравнения (15) в случае присутствия электромагнитного поля.

Для этого к символическому уравнению (24) мы применим оператор  $P_4 - \left( \sum_i^3 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right)$ . Мы получаем:

$$\left( P_4 - \sum_i^3 \alpha_i P_i - \alpha_4 m_0 c \right) \left( P_4 + \sum_i^3 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (26)$$

Если мы раскроем указанные операторы, принимая во внимание соотношения (16), мы найдем:

$$\begin{aligned} & \left[ P_4^2 + \sum_i^3 \alpha_i (P_4 P_i - P_i P_4) - \sum_i^3 P_i^2 - \right. \\ & \left. - \sum_{i \neq j} (x_i x_j P_i P_j + x_j x_i P_j P_i) - m_0^2 c^2 \right] \Psi = 0 \end{aligned} \quad (27)$$

Вспомним теперь, что электромагнитные поля связаны с потенциалами при помощи соотношений

$$\vec{h} = -\text{grad } V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{H} = \text{rot } \vec{A} \quad (28)$$

Принимая во внимание определения (6) и условия (16), после небольшого вычисления мы получаем

$$\sum_1^3 \alpha_i (P_+ P_i - P_i P_+) = -\frac{\hbar}{2\pi i} \cdot \frac{e}{c} (\alpha_1 h_x + \alpha_2 h_y + \alpha_3 h_z) \quad (29)$$

$$\sum_{\neq j} (\alpha_i \alpha_j P_i P_j + \alpha_j \alpha_i P_j P_i) = -\frac{\hbar}{2\pi i} \cdot \frac{e}{c} (\alpha_2 \alpha_3 H_x + \alpha_3 \alpha_1 H_y + \alpha_1 \alpha_2 H_z).$$

Таким образом уравнение (27) принимает вид

$$\left[ P_i^2 - \sum_1^3 P_i^2 - m_0^2 c^2 - \frac{e}{c} \cdot \frac{\hbar}{2\pi i} (\alpha_1 h_x + \alpha_2 h_y + \alpha_3 h_z) + \frac{e}{c} \frac{\hbar}{2\pi i} (\alpha_2 \alpha_3 H_x + \alpha_3 \alpha_1 H_y + \alpha_1 \alpha_2 H_z) \right] \Psi = 0 \quad (30)$$

Если бы были только первые три члена в скобках, то мы вернулись бы к уравнению (5), которое таким образом было бы действительным для каждой  $\Psi_i$ . Новый элемент, который вносится теорией Дирака, это введение дополнительных выражений в (30). Чтобы раскрыть смысл этих дополнительных выражений, рассмотрим нерелятивистское уравнение (2), которое мы можем написать в виде

$$\left( 2m_0 c \cdot p_i - \sum_1^3 p_i^2 - 2m_0 U \right) \Psi = 0. \quad (31)$$

Сравнивая (31) с (30), мы замечаем, что мы можем считать рассматриваемые дополнительные выражения, как выражения потенциальной энергии, но с условием, что разделим их на  $\frac{1}{2m_0}$ . Только в механике Дирака роль, которую в прежних теориях играло  $m_0$ , играет  $-\alpha_4 m_0$ , как мы это увидим позднее<sup>1)</sup>. Итак, мы условимся определять оба члена потенциальной энергии, помножая *спереди* оба дополнительных выражения (30) на  $\frac{1}{2m_0 \alpha_4} = \frac{\alpha_4}{2m_0}$ . Учитывая соотношения коммутации между  $\alpha_i$ , мы должны будем положить:

$$U_e = -\frac{eh}{4\pi m_0 c} i (\alpha_1 \alpha_4 h_x + \alpha_2 \alpha_4 h_y + \alpha_3 \alpha_4 h_z)$$

$$U_m = -\frac{eh}{4\pi m_0 c} i (\alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 H_x + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_4 H_y + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4 H_z) \quad (32)$$

Далее, нам нужно помнить, что тело с электрическим моментом  $\vec{\mathfrak{P}}$ , помещенное в электрическое поле  $\vec{h}$ , обладает потенциальной энергией  $-(\vec{\mathfrak{P}} \cdot \vec{h})$ , в то время как тело с магнитным

<sup>1)</sup> См. главу XV, параграф 4.



моментом  $\vec{\mathcal{M}}$ , помещенное в магнитном поле  $\vec{H}$ , обладает потенциальной энергией  $-(\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{H})$ . Таким образом, мы приходим к тому, что следует приписать электрону магнитный момент с составляющими

$$\mathcal{M}_x = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4; \quad \mathcal{M}_y = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_3 \alpha_1 \alpha_4; \\ \mathcal{M}_z = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4 \quad (33)$$

и электрический момент с составляющими

$$\mathcal{P}_x = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_1 \alpha_4; \quad \mathcal{P}_y = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_2 \alpha_4; \quad \mathcal{P}_z = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \alpha_3 \alpha_4 \quad (34)$$

Выражаясь с большей точностью, количества (33) и (34) суть операторы, соответствующие составляющим обоих моментов. Так как  $\frac{eh}{4\pi m_0 c}$  есть магнетон Бора, мы видим, что уравнения Дирака автоматически приписывают электрону собственный магнетизм, связанный с магнетоном Бора. Итак мы видим, как появляется магнетизм электрона, и вскоре мы будем иметь случай уточнить это первое указание. Формулы (34) к тому же показывают нам, что электрон Дирака обладает также электрическим моментом, смысл которого мы увидим несколько позднее.

Составляющие обоих моментов, определяемые (33) и (34), суть операторы, поскольку они выражаются с помощью  $\alpha_i$ . Это несколько не должно нас удивлять, так как мы уже привыкли видеть, что в новой механике физические величины уступают место операторам. Кроме того, легко доказать, что операторы (33) и (34) эрмитовы; действительно, так как  $\alpha_i$  эрмитовы и антикоммутируют между собой, то такие произведения, например, как  $\alpha_1 \alpha_2$  или  $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_4$ , антиэрмитовы, а следовательно их произведение на  $i$  — эрмитово. Таким образом, операторы (33) и (34) обладают характером, необходимым для представления физических величин.

Так устранена трудность, которая существовала в первоначальном представлении Дирака, который писал формулы (33) и (34) без множителя  $\alpha_4$  и, таким образом, получал неэрмитовы составляющие электрического момента.

## Релятивистская инвариантность уравнений Дирака

## 1. Инвариантность уравнений Дирака относительно преобразования Лоренца

Уравнения Дирака приписывают особенную роль оси  $oz$  и волновые функции, точно так же как и в теории Паули, дадут ответ на вопросы, в которых играет роль ось  $oz$ . Если мы хотим поставить те же вопросы в отношении оси  $oz'$ , отличной от  $oz$ , мы должны будем написать уравнения Дирака в системе, где  $oz'$  будет третьей осью. Мы должны быть в состоянии написать уравнения Дирака *в одной и той же форме* для всех систем осей, причем четыре волновые функции преобразуются определенным образом, когда мы переходим от одной системы осей к другой.

Уравнения Дирака, как и уравнения Паули, не только обладают этой инвариантностью в отношении изменений пространственных координат, но они точно также инвариантны для всех преобразований Лоренца и, следовательно, удовлетворяют принципу относительности.

Известно, что преобразование Лоренца наиболее общего типа всегда может быть разложено на три последовательные преобразования. Исходя из первоначальной системы  $xuzt$  пространственно-временных координат, мы имеем:

1. Вращение вокруг  $oz$ , определяемое формулами типа:

$$x = x' \cos \alpha - y' \sin \alpha; \quad y = y' \cos \alpha + x' \sin \alpha; \quad z = z'; \quad t = t'. \quad (1)$$

2. Вращение вокруг оси  $oy$ , перпендикулярной  $oz$ , определяемое:

$$z = z' \cos \theta - x' \sin \theta; \quad x = x' \cos \theta + z' \sin \theta; \quad y = y'; \quad t = t'. \quad (2)$$

3. *Простое* преобразование Лоренца, т. е. переход от системы  $oxuzt$  к системе  $o'x'y'z't'$ , равномерно движущейся относительно первой, причем оси  $z$  и  $z'$  скользят одна по другой, а остальные оси остаются соответственно параллельны. Тогда мы имеем хорошо известные формулы преобразования:

$$x = x'; \quad y = y'; \quad z = \frac{z' + \beta ct'}{\sqrt{1 - \beta^2}}; \quad t = \frac{t' + \frac{\beta}{c} x'}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (3)$$

где  $\beta c$  — скорость второй системы относительно первой. Если мы положим:

$$\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = ch\gamma \quad \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = Vch^2\gamma - 1 = sh\gamma \quad (4)$$

формулы (3) примут вид:

$$x = x'; \quad y = y'; \quad z = z' ch\gamma + ct' sh\gamma; \quad ct = ct' ch\gamma + z' sh\gamma \quad (5)$$

Комбинируя три типа преобразований 1, 2 и 3, можно получить преобразование Лоренца наиболее общего типа.

Инвариантность уравнений Дирака для общего преобразования Лоренца будет доказана, если удастся разрешить следующую задачу: зная, что в системе галилеевых осей  $xyzt$  уравнения Дирака:

$$(P_4 + \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + \alpha_3 P_3 + \alpha_4 m_0 c) \Psi = 0 \quad (6)$$

имеют решениями функции  $\Psi_1(xyzt)$ ,  $\Psi_2(xyzt)$ ,  $\Psi_3(xyzt)$ ,  $\Psi_4(xyzt)$  показать, что в другой системе галилеевых осей  $x'y'z't'$  уравнения Дирака:

$$(P'_4 + \alpha_1 P'_1 + \alpha_2 P'_2 + \alpha_3 P'_3 + \alpha_4 m_0 c) \Psi' = 0, \quad (7)$$

где мы имеем:

$$P'_1 = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{e}{c} A'_x, \dots \dots P'_4 = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{e}{c} V, \quad (8)$$

имеют решениями функции  $\Psi'_1(x'y'z't')$ ,  $\Psi'_2(x'y'z't')$ ,  $\Psi'_3(x'y'z't')$  и  $\Psi'_4(x'y'z't')$ , которые выражаются линейно как функции от  $\Psi_1 \dots \Psi_4$  формулами, где фигурируют параметры, которые определяют переход от системы  $oxyzt$  к системе  $o'x'y'z't'$ .

Поставленную так задачу достаточно разрешить для трех преобразований 1, 2 и 3, указанных выше, так как всякое преобразование Лоренца можно разложить на преобразования этих трех типов.

1. Вращение вокруг  $oz$ :

Будем исходить из уравнений:

$$\begin{aligned} (P_4 + m_0 c) \Psi_1 + (P_1 + iP_2) \Psi_4 + P_3 \Psi_3 &= 0 \\ (P_4 + m_0 c) \Psi_2 + (P_1 - iP_2) \Psi_3 - P_3 \Psi_4 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_3 + (P_1 + iP_2) \Psi_2 + P_3 \Psi_1 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_4 + (P_1 - iP_2) \Psi_1 - P_3 \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Так как изменение переменных выражается формулами (1), мы имеем:

$$\begin{aligned} P_1 = P'_1 \cos \alpha - P'_2 \sin \alpha; \quad P_2 = P'_2 \cos \alpha + P'_1 \sin \alpha \\ P_3 = P'_3; \quad P_4 = P'_4 \end{aligned} \quad (10)$$

и, подставляя в (9), мы легко находим:

$$\begin{aligned} (P'_4 + m_0c) \Psi'_1 + (P'_1 e^{i\alpha} + iP'_2 e^{i\alpha}) \Psi'_4 + P'_3 \Psi'_3 &= 0 \\ (P'_4 + m_0c) \Psi'_2 + (P'_1 e^{-i\alpha} - iP'_2 e^{-i\alpha}) \Psi'_3 - P'_3 \Psi'_4 &= 0 \\ (P'_4 - m_0c) \Psi'_3 + (P'_1 e^{i\alpha} + iP'_2 e^{i\alpha}) \Psi'_2 + P'_3 \Psi'_1 &= 0 \\ (P'_4 - m_0c) \Psi'_4 + (P'_1 e^{-i\alpha} - iP'_2 e^{-i\alpha}) \Psi'_1 - P'_3 \Psi'_2 &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

В этих уравнениях предполагается, что  $\Psi_i$  выражаются как функции штрихованных переменных при помощи соотношений преобразования (1). Помножив первое и третье уравнения (10) на  $e^{-i\frac{\alpha}{2}}$ , второе и четвертое на  $e^{i\frac{\alpha}{2}}$ , мы получаем:

$$\begin{aligned} (P'_4 + m_0c) \Psi'_1 e^{-i\frac{\alpha}{2}} + (P'_1 + iP'_2) \Psi'_4 e^{i\frac{\alpha}{2}} + P'_3 \Psi'_3 e^{-i\frac{\alpha}{2}} &= 0 \\ (P'_4 + m_0c) \Psi'_2 e^{i\frac{\alpha}{2}} + (P'_1 - iP'_2) \Psi'_3 e^{-i\frac{\alpha}{2}} - P'_3 \Psi'_4 e^{i\frac{\alpha}{2}} &= 0 \\ (P'_4 - m_0c) \Psi'_3 e^{-i\frac{\alpha}{2}} + (P'_1 + iP'_2) \Psi'_1 e^{-i\frac{\alpha}{2}} + P'_3 \Psi'_4 e^{-i\frac{\alpha}{2}} &= 0 \\ (P'_4 - m_0c) \Psi'_4 e^{i\frac{\alpha}{2}} + (P'_1 - iP'_2) \Psi'_2 e^{i\frac{\alpha}{2}} - P'_3 \Psi'_3 e^{i\frac{\alpha}{2}} &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Система (11) показывает нам, что функции  $\Psi'_i$  связаны с функциями  $\Psi_i$  простыми формулами:

$$\begin{aligned} \Psi'_1(x' y' z' t') &= \Psi_1(x' y' z' t') e^{-i\frac{\alpha}{2}}; \\ \Psi'_2(x' y' z' t') &= \Psi_2(x' y' z' t') e^{i\frac{\alpha}{2}}; \\ \Psi'_3(x' y' z' t') &= \Psi_3(x' y' z' t') e^{-i\frac{\alpha}{2}}; \\ \Psi'_4(x' y' z' t') &= \Psi_4(x' y' z' t') e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{aligned} \quad (12)$$

и требуемое доказательство для данного случая найдено.

## 2. Вращение вокруг $ou$ :

Преобразование координат дано (2), а преобразование волновых функций Дирака дается формулами:

$$\begin{aligned} \Psi'_1(x' y' z' t') &= \Psi_1(x' y' z' t') \cos \frac{\theta}{2} + \Psi_2(x' y' z' t') \sin \frac{\theta}{2} \\ \Psi'_2(x' y' z' t') &= \Psi_2(x' y' z' t') \cos \frac{\theta}{2} - \Psi_1(x' y' z' t') \sin \frac{\theta}{2} \\ \Psi'_3(x' y' z' t') &= \Psi_3(x' y' z' t') \cos \frac{\theta}{2} + \Psi_4(x' y' z' t') \sin \frac{\theta}{2} \\ \Psi'_4(x' y' z' t') &= \Psi_4(x' y' z' t') \cos \frac{\theta}{2} - \Psi_3(x' y' z' t') \sin \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (13)$$

Это доказывается путем рассуждений, аналогичных рассуждениям для случая 1.

## 3. Простое преобразование Лоренца

Так как преобразование координат выражается формулами (5), преобразование функций Дирака дается:

$$\begin{aligned} \Psi'_1(x' y' z' t') &= \Psi_1(x' y' z' t') \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} + \Psi_3(x' y' z' t') \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \\ \Psi'_2(x' y' z' t') &= \Psi_2(x' y' z' t') \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \Psi_4(x' y' z' t') \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \\ \Psi'_3(x' y' z' t') &= \Psi_3(x' y' z' t') \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} + \Psi_1(x' y' z' t') \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \\ \Psi'_4(x' y' z' t') &= \Psi_4(x' y' z' t') \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \Psi_2(x' y' z' t') \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \end{aligned} \quad (14)$$

Это доказывается тем же самым способом. И, таким образом, доказана инвариантность уравнений Дирака для наиболее общего преобразования Лоренца.

Из формул (12), (13) и (14) видно, что  $\Psi_i$  не преобразуются, как координаты. Следовательно, они, как это мы уже говорили, не имеют характера составляющих пространственно-временного вектора. Но мы скоро научимся составлять при помощи  $\Psi_i$  определенные выражения, которые будут иметь векторный или тензорный характер и будут иметь физическое значение.

## 2. Более строгое доказательство релятивистской инвариантности

Мы приведем более строгое доказательство инвариантности уравнений Дирака. Это доказательство, данное фон Нейманом, является обобщением доказательства, которое употреблял Паули, чтобы показать инвариантность своих уравнений по отношению к изменению прямоугольных координат в пространстве.

Возьмем уравнение Дирака в его символической форме:

$$\left( P_4 + \sum_1^3 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (15)$$

и применим к нему сначала оператор  $\alpha_4$ . Мы получаем ( $\alpha_4^2 = 1$ ):

$$\left( \alpha_4 P_4 + \sum_1^3 \alpha_4 \alpha_i P_i + m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (16)$$

Теперь мы возьмем вместо переменных  $x, y, z, t$  пространственно-временные переменные Минковского:

$$x_1 = x \quad x_2 = y \quad x_3 = z \quad x_4 = ict \quad (17)$$

и определим соответствующие операторы:

$$\begin{aligned} \pi_1 &= -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{e A_1}{c} = P_1; \quad \pi_2 = P_2; \quad \pi_3 = P_3; \\ \pi_4 &= -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{c} i V = -\frac{P_4}{i} \end{aligned} \quad (18)$$

Тогда уравнение (16) примет вид

$$\left( \alpha_4 \pi_4 + \sum_1^3 i \alpha_4 \alpha_i \pi_i + i m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (19)$$

Теперь положим (фон Нейман):

$$\gamma_1 = i \alpha_4 \alpha_1 \quad \gamma_2 = i \alpha_4 \alpha_2 \quad \gamma_3 = i \alpha_4 \alpha_3 \quad \gamma_4 = \alpha_4 \quad (20)$$

Легко убедиться, что формулы

$$\gamma_i^2 = 1 \quad \gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i = 0 \quad (i \neq j) \quad (21)$$

можно резюмировать, написав

$$\gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i = 2 \delta_{ij} \cdot 1 \quad (22)$$

где 1 — единичная матрица. Можно доказать также, что  $\gamma_i$  эрмитовы.

С этими обозначениями уравнение (19) принимает очень удобную компактную форму

$$\left( \sum_1^4 \gamma_i \pi_i + i m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (23)$$

Теперь предположим, что мы производим изменение галилеевых осей, общее преобразование Лоренца. Из теории относительности хорошо известно, что общее преобразование Лоренца эквивалентно вращению осей в мире Минковского. Следовательно, новые переменные  $x'_i$  после преобразования будут связаны с прежними переменными  $x_i$  при помощи формул:

$$x_i = \sum_j o_{ij} x'_j \quad (24)$$

где  $o$  — матрица с 4 строками и 4 столбцами<sup>1)</sup>, удовлетворяющая соотношению ортогональности:

$$\sum_i o_{ik} o_{ij} = \delta_{kj} \quad (25)$$

Таким образом очевидно, что  $\pi_i$  преобразовываются, как  $x_i$ , т. е., что

$$\pi_i = \sum_j o_{ij} \pi'_j \quad (26)$$

Следовательно, после преобразования координат, уравнение (23) примет вид

$$\left( \sum_1^4 \gamma_i \sum_1^4 o_{ij} \pi'_j + i m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (27)$$

<sup>1)</sup> Матрица  $o$  не действительна; те из ее элементов, которые содержат индекс 4 один раз, — чисто мнимые.

где функции  $\Psi$  должны быть выражены при помощи новых переменных  $x'_i$ . Если мы положим

$$\gamma'_j = \sum_1^4 o_{ij} \gamma_i \quad (28)$$

мы сможем заменить (27) на:

$$\left( \sum_1^4 \gamma'_j \kappa'_j + i m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (29)$$

Уравнение (28) выражает матрицы  $\gamma'_j$ , как функции от матриц  $\gamma_i$ . Если хотят уточнить его смысл, нужно написать:

$$\gamma'_{j, mn} = \sum_1^4 o_{ij} \gamma_{i, mn} \quad (30)$$

где  $\gamma_{i, mn}$ , например, обозначает элемент с индексами  $m, n$  матрицы  $\gamma_i$ .

Так как мы имеем

$$\gamma'^*_{j, nm} = \sum_1^4 o^*_{ij} \gamma^*_{i, nm} = \sum_1^4 o^*_{ij} \gamma_{i, mn} \neq \gamma'_{j, mn} \quad (31)$$

в силу эрмитности  $\gamma_i$  мы видим, что вообще  $\gamma'_i$  не эрмитовы, так как ни одна из  $o_{ij}$  не действительна.

Легко проверить, что  $\gamma'_i$  удовлетворяют условиям (22). Действительно, мы имеем:

$$\begin{aligned} \gamma'_i \gamma'_j + \gamma'_j \gamma'_i &= \sum_{\kappa} o_{\kappa i} \gamma_{\kappa} \cdot \sum_l o_{lj} \gamma_l + \sum_l o_{lj} \gamma_l \cdot \sum_{\kappa} o_{\kappa i} \gamma_{\kappa} = \\ &= \sum_{\kappa} \sum_l o_{\kappa i} o_{lj} (\gamma_{\kappa} \gamma_l + \gamma_l \gamma_{\kappa}) = \\ &= \sum_{\kappa} \sum_l o_{\kappa i} o_{lj} \cdot 2 \delta_{\kappa l} = 2 \sum_{\kappa} o_{\kappa i} o_{\kappa j} = 2 \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (32)$$

Существенным пунктом рассуждения является то, что существует матрица  $\Lambda$  с 4 строчками и 4 столбцами такая, что:

$$\gamma'_i = \Lambda^{-1} \gamma_i \Lambda \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (33)$$

Если соотношение (33) справедливо, факт, что  $\gamma_i$  удовлетворяют соотношениям (22), обуславливает, что  $\gamma'_i$  удовлетворяют аналогичным соотношениям:

$$\gamma'_i \gamma'_j + \gamma'_j \gamma'_i = 2 \delta_{ij} \quad (34)$$

Так как мы можем уравнение (33) написать в виде

$$\Lambda \gamma'_i = \gamma_i \Lambda \quad (i = 1, 2, 3, 4), \quad (35)$$

то, для того, чтобы доказать существование матрицы  $\Lambda$ , следовало бы показать, что существует (16) величин  $\Lambda_{kl}$ , удовлетворяющих 64 уравнениям:

$$\sum_1^4 \Lambda_{kl} \gamma'_{i, lm} = \sum_1^4 \gamma_{i, kl} \Lambda_{lm} \quad (36)$$

где индексы  $k, m, i$  могут принимать значения 1, 2, 3, 4. Существование матрицы  $\Lambda$  *a priori* совершенно не очевидно. Однако, мы примем провизорно существование этой матрицы, чтобы доказать эту гипотезу *a posteriori*.

Прежде чем идти вперед, заметим, что матрица  $\Lambda$  вообще не может быть унитарной. Действительно, если бы она была унитарной, мы имели бы

$$\Lambda^\dagger = \Lambda^{-1}; \quad \Lambda = (\Lambda^{-1})^\dagger \quad (37)$$

и так как из уравнения (33) мы выводим, беря сопряженное уравнение:

$$\gamma_i'^{\dagger} = (\Lambda^{-1} \gamma_i \Lambda)^\dagger = \Lambda^\dagger \gamma_i^\dagger (\Lambda^{-1})^\dagger, \quad (38)$$

мы имели бы в силу (37) и эрмитности  $\gamma_i$ :

$$\gamma_i'^{\dagger} = \Lambda^{-1} \gamma_i \Lambda = \gamma_i'. \quad (39)$$

И в результате выходит, что  $\gamma_i'$  была бы эрмитовой, а этого, вообще говоря, не может быть.

Теперь возьмем опять уравнение (29), вводя в него соотношение (33). Получается

$$\left( \sum_1^4 \Lambda^{-1} \gamma_j \Lambda \pi_j' + i m_0 c \right) \Psi = 0 \quad (40)$$

Помножим спереди на  $\Lambda$  и заметим, что матрица  $\Lambda$ , соответствующая действию, производимому над индексом Дирака, коммутирует с  $\pi_j'$ . Мы получаем:

$$\left( \sum_1^4 \gamma_j \pi_j' + i m_0 c \right) \Lambda \Psi = 0 \quad (41)$$

Формула (41) выражает следующую теорему:

**Теорема:** Когда мы производим преобразование Лоренца, можно для уравнений Дирака сохранить ту же форму, но новые волновые функции  $\Psi_i'$  связаны с прежними  $\Psi_i$  при помощи линейного преобразования:

$$\Psi_i'(x', y', z', t') = \Lambda \Psi_i(x', y', z', t') = \sum_1^4 \Lambda_{ik} \Psi_k(x', y', z', t') \quad (42)$$

Это как раз в точности результат, установленный в параграфе 1.



Теперь мы можем доказать гипотезу существования матрицы  $\Lambda$ . Действительно, в параграфе 1 мы научились вычислять линейное преобразование, которому подвергается каждая функция  $\Psi_i$  для каждого из трех видов изменения координат, на которые можно разложить всякое общее преобразование Лоренца. Следовательно, мы знаем, по крайней мере в принципе, как вычислить линейное преобразование  $\Psi'_i$ , которое соответствует любому преобразованию Лоренца, т. е. определить элементы такой матрицы  $\Lambda$ , что

$$\Psi'_i(x' y' z' t') = \Lambda \Psi_i(x', y', z', t) \quad (43)$$

Эта матрица  $\Lambda$  по (42) должна быть такою же точно, какая фигурирует в (33), и, поскольку мы умеем ее вычислять, мы уверены, что она существует.

Обращаясь к формулам (12), (13) и (14), можно непосредственно написать выражение матрицы  $\Lambda$ , которые соответствуют простым случаям 1, 2 и 3 предыдущего параграфа. Рассмотрим, например, случай 3: простое преобразование Лоренца. Формулы (14) показывают нам, что матрица  $\Lambda$  имеет следующую форму:

$$\Lambda = \begin{vmatrix} ch \frac{\gamma}{2} & 0 & sh \frac{\gamma}{2} & 0 \\ 0 & ch \frac{\gamma}{2} & 0 & -sh \frac{\gamma}{2} \\ sh \frac{\gamma}{2} & 0 & ch \frac{\gamma}{2} & 0 \\ 0 & -sh \frac{\gamma}{2} & 0 & ch \frac{\gamma}{2} \end{vmatrix} \quad (44)$$

Легко убедиться, что эта матрица не унитарна ( $\Lambda^\dagger \neq \Lambda^{-1}$ ). Вы-

ходит, что  $\sum_i \Psi_i^* \Psi_i$  не равно  $\sum_i \Psi'_i{}^* \Psi'_i$ . Следовательно, плот-

ность вероятности изменяет свое значение для простого преобразования Лоренца. Действительно, мы увидим, что эта плотность не инвариантна, а есть временная составляющая пространственно-временного вектора.

### 3. Электромагнитная инвариантность уравнений Дирака

Наряду с релятивистскою инвариантностью уравнения Дирака имеют другой вид инвариантности, который я назову электромагнитной инвариантностью (то-есть *Eichinvarianz* немецких авторов). Объясним, в чем она заключается.

Так как электрическое поле  $\vec{h}$  и магнитное поле  $\vec{H}$  определяются, как функции потенциалов, формулами

$$\vec{h} = -\text{grad } V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \vec{H} = \text{rot } \vec{A} \quad (45)$$

очевидно, если мы заменим  $V$  и  $\vec{A}$  на:

$$V' = V - \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad \vec{A}' = \vec{A} + \text{grad } \Phi \quad (46)$$

где  $\Phi$  — какая-нибудь функция  $xuzt$ , поля несколько не изменятся, так как мы имеем:

$$\text{rot } A' = \text{rot } A - \text{grad } V' - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} = -\text{grad } V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (47)$$

Поскольку это поля, которые выражают динамические действия, и поскольку они не чувствительны к преобразованию потенциалов формы (46), мы должны ожидать, что уравнения Дирака инвариантны по отношению к этим преобразованиям (46). Это и есть электромагнитная инвариантность.

Напишем символическое уравнение Дирака:

$$\left[ \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{eV}{c} \right) + \sum_1^3 \alpha_j \left( -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e}{c} A_j \right) + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi = 0 \quad (48)$$

затем предположим, что мы подвергаем потенциалы преобразованию (46). Заменяя  $V$  и  $A_j$  как функции от  $V'$  и  $A'_j$ , мы получаем вместо (48):

$$\left[ \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{eV'}{c} + \frac{e}{c^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) + \sum_1^3 \alpha_j \left( -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e}{c} A'_j - \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi = 0 \quad (49)$$

Легко показать, что, если мы положим:  $\Psi' = \Psi e^{-\frac{2\pi i}{h} \frac{e}{c} \Phi}$ , то мы снова найдем уравнение, имеющее ту же форму, что (48), т. е.

$$\left[ \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{c} V' \right) + \sum_1^3 \alpha_j \left( -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e}{c} A'_j \right) + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi' = 0 \quad (50)$$

Следовательно, переход от потенциалов  $V$  и  $\vec{A}$  к потенциалам  $V'$  и  $\vec{A}'$  не изменяет формы уравнения Дирака, но каждая из  $\Psi_\kappa$  умножается на  $e^{-\frac{2\pi i}{h} \frac{e}{c} \Phi}$ .

Но мы знаем, что не  $\Psi_\kappa$ , а определенные комбинации  $\Psi_\kappa$  имеют физический смысл. И можно доказать, что все комбинации этого рода не изменяются, когда мы замещаем в них  $\Psi_\kappa$  на  $\Psi_\kappa e^{-\frac{2\pi i}{h} \frac{e}{c} \Phi}$ . Это сразу же видно, например, для плотности вероятности  $\sum_1^4 \Psi_\kappa^* \Psi_\kappa$ . Эта нечувствительность количеств, имеющих физический смысл, по отношению к преобразованиям (46) составляет электромагнитную инвариантность уравнений Дирака.

## Глава XII

### Плотность и ток в теории Дирака. Плоские волны

#### 1. Выражения для плотности и потока вероятности

В теории Дирака мы должны найти способ перенесения идеи волновой механики с одной функцией  $\Psi$ . В частности мы должны найти плотность  $\rho$  вероятности присутствия электрона и определить поток  $\vec{\rho u}$  этой вероятности. Выражения  $-e\rho$  и  $-e\rho\vec{u}$  дадут здесь также среднюю электрическую плотность и средний электрический ток, при помощи которых вычисляются средние излучения, испускаемые совокупностями электронов.

Чтобы найти форму  $\rho$  и  $\rho\vec{u}$ , мы всегда должны руководствоваться идеей, что полная вероятность присутствия должна оставаться постоянной (равной 1) и что вследствие этого уравнение непрерывности  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{u}) = 0$  должно быть следствием волновых уравнений.

Напишем четыре уравнения Дирака и четыре сопряженных уравнения:

$$\begin{aligned} (P_4 + m_0 c) \Psi_1 + (P_1 + iP_2) \Psi_4 + P_3 \Psi_3 &= 0 \\ (P_4 + m_0 c) \Psi_2 + (P_1 - iP_2) \Psi_3 - P_3 \Psi_4 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_3 + (P_1 + iP_2) \Psi_2 + P_3 \Psi_1 &= 0 \\ (P_4 - m_0 c) \Psi_4 + (P_1 - iP_2) \Psi_1 - P_3 \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} (P_4^* + m_0 c) \Psi_1^* + (P_1^* - iP_2^*) \Psi_4^* + P_3^* \Psi_3^* &= 0 \\ (P_4^* + m_0 c) \Psi_2^* + (P_1^* + iP_2^*) \Psi_3^* - P_3^* \Psi_4^* &= 0 \\ (P_4^* - m_0 c) \Psi_3^* + (P_1^* - iP_2^*) \Psi_2^* + P_3^* \Psi_1^* &= 0 \\ (P_4^* - m_0 c) \Psi_4^* + (P_1^* + iP_2^*) \Psi_1^* - P_3^* \Psi_2^* &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Помножим уравнения (1) соответственно на  $\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*$  и уравнения (2) соответственно на  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$ . Возьмем, далее, сумму уравнений (1) и вычтем из нее сумму уравнений (2). Члены с  $m_0 c$  уничтожаются. Мы находим члены формы:

$$\begin{aligned} \Psi_i^* P_4 \Psi_i - \Psi_i P_4^* \Psi_i^* &= \Psi_i^* \left( \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{c} V \right) \Psi - \\ - \Psi_i^* \left( -\frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{c} V \right) \Psi^* &= \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_i^* \Psi_i) \end{aligned}$$

а также члены вида:

$$\begin{aligned} \Psi_i^* P_1 \Psi_i - \Psi_i P_1^* \Psi_i^* &= \Psi_i^* \left( -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) \Psi_i - \\ &- \Psi_i^* \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) \Psi_i = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} (\Psi_i^* \Psi_i) \end{aligned}$$

Наконец, после умножения на  $\frac{2\pi i c}{\hbar}$  мы находим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4) + \frac{\partial}{\partial x} \left[ -c (\Psi_1^* \Psi_4 + \right. \\ \left. + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ -c (i \Psi_1^* \Psi_4 - i \Psi_2^* \Psi_3 + \right. \\ \left. + i \Psi_3^* \Psi_2 - i \Psi_4^* \Psi_1) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ -c (\Psi_1^* \Psi_3 - \Psi_2^* \Psi_4 + \Psi_3^* \Psi_1 \right. \\ \left. - \Psi_4^* \Psi_2) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Уравнение (3) эквивалентно уравнению непрерывности, если мы положим:

$$\begin{aligned} \rho &= \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4 \\ \rho u_x &= -c (\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1) \\ \rho u_y &= -c (i \Psi_1^* \Psi_4 - i \Psi_2^* \Psi_3 + i \Psi_3^* \Psi_2 - i \Psi_4^* \Psi_1) \\ \rho u_z &= -c (\Psi_1^* \Psi_3 - \Psi_2^* \Psi_4 + \Psi_3^* \Psi_1 - \Psi_4^* \Psi_2) \end{aligned} \quad (4)$$

Без труда можно проверить, что выражения (4) — действительны, ибо они равны своим сопряженным. Следовательно, их можно считать определяющими плотность вероятности и составляющими соответствующего тока.

Выражение  $\rho$  имеет в точности вид, предполагавшийся Дираком. Оно показывает, что мы должны нормировать  $\Psi_i$ , написав:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int \int (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4) d\tau = 1. \quad (5)$$

и что, если эта нормировка произведена в какой-нибудь период, она затем остается навсегда.

Формулам (4) можно придать компактную и изящную форму, пользуясь тремя матрицами  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  и единичной матрицей (с 4 строками и 4 столбцами). Напишем эти матрицы:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

и сравним их с формулами (4). Мы теперь видим, что их можно написать в виде:

$$\rho = \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot 1 \Psi_i; \quad \rho u_x = -c \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot \alpha_1 \Psi_i; \quad (7)$$

$$\rho u_y = -c \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot \alpha_2 \Psi_i; \quad \rho u_z = -c \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot \alpha_3 \Psi_i.$$

Вполне естественно, средняя электрическая плотность  $\delta$  и составляющие среднего тока  $j_x, j_y$  и  $j_z$  получаются после умножения  $\rho, \rho u_x$  и т. д. на  $-e$ . Мы имеем:

$$\delta = -e\rho; \quad j_x = -e\rho u_x; \quad j_y = -e\rho u_y; \quad j_z = -e\rho u_z \quad (8)$$

## 2. Векторный характер плотности и тока

Количества (4), которые имеют физический смысл, имеют характер составляющих пространственно-временного вектора, причем  $\rho$  является временной составляющей. Чтобы это доказать, достаточно, например, проверить, что для каждого из трех преобразований, указанных в первом параграфе предыдущей главы, количества (4) преобразуются, как координаты, откуда следует, что то же самое справедливо и для наиболее общих преобразований Лоренца.

Укажем ход проверки для преобразования типа 1: вращение вокруг  $oz$ . Между прежними и новыми переменными мы имеем такие соотношения:

$$x = x' \cos \alpha - y' \sin \alpha \quad y = y' \cos \alpha + x' \sin \alpha \quad z = z' \quad t = t' \quad (9)$$

откуда также:

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha \quad y' = y \cos \alpha - x \sin \alpha \quad z' = z \quad t' = t \quad (10)$$

Мы уже видели, что тогда функции  $\Psi_i$  преобразовываются следующим образом

$$\Psi'_1 = \Psi_1 e^{-i \frac{\alpha}{2}}; \quad \Psi'_2 = \Psi_2 e^{+i \frac{\alpha}{2}};$$

$$\Psi'_3 = \Psi_3 e^{-i \frac{\alpha}{2}}; \quad \Psi'_4 = \Psi_4 e^{+i \frac{\alpha}{2}} \quad (11)$$

В таком случае, очевидно, что мы имеем:

$$\rho' = \sum_1^4 \Psi_i'^* \Psi_i' = \sum_1^4 \Psi_i^* \Psi = \rho. \quad (12)$$

Плотность  $\rho$  остается инвариантной при преобразовании, как переменная  $t$ . Точно также легко видеть, что:  $\rho' u_z' = \rho u_z$ ; составляющая  $z$  тока остается инвариантной, как переменная  $z$ . Для составляющей же  $x$  мы имеем:

$$\begin{aligned} \rho' u_x' &= -c(\Psi_1'^* \Psi_4' + \Psi_2'^* \Psi_3' + \Psi_3'^* \Psi_2' + \Psi_4'^* \Psi_1') = \\ &= -c(\Psi_1^* \Psi_4 e + \Psi_2^* \Psi_3 e^{-i\alpha} + \Psi_3^* \Psi_2 e^{i\alpha} + \Psi_4^* \Psi_1 e^{-i\alpha}) = \\ &= -c(\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 - \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1) \cos \alpha - \\ &\quad - i(\Psi_1^* \Psi_4 - \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 - \Psi_4^* \Psi_1) \sin \alpha = \\ &= \rho u_x \cos \alpha + \rho u_y \sin \alpha \end{aligned} \quad (13)$$

Следовательно, составляющая  $\rho u_x$  преобразуется, как переменная  $x$ , и мы можем точно таким же образом проверить, что  $\rho u_y$  преобразуется, как  $y$ .

Точно также мы поступаем для изучения преобразований плотности и тока в случаях 2 и 3 (вращение вокруг  $ou$  и простое преобразование Лоренца) и приходим к заключению, что 4 количества (4) представляют собой составляющие пространственно-временного вектора.

Мы знаем, что, если пространственно-временной вектор  $\vec{a}$  имеет пространственными составляющими  $a_1, a_2, a_3$  и временной составляющей  $a_4$ , то количество  $c^2 a_4^2 - a_1^2 - a_2^2 - a_3^2$ , которым измеряется его длина в пространстве-времени, является инвариантом, независимым от выбора галилеевой системы координат. Если мы вычислим длину вектора плотность-ток, после нетрудного, но достаточно длинного вычисления мы находим:

$$c^2 \rho^2 - (\rho u_x)^2 - (\rho u_y)^2 - (\rho u_z)^2 = c^2 [\Omega_1^2 + \Omega_2^2] \quad (14)$$

где:

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 - \Psi_3^* \Psi_3 - \Psi_4^* \Psi_4 = \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot \alpha_i \Psi \\ \Omega_2 &= +i\Psi_1^* \Psi_3 + i\Psi_2^* \Psi_4 - i\Psi_3^* \Psi_1 - i\Psi_4^* \Psi_3 = \\ &= \sum_1^4 \Psi_i^* \cdot \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_i. \end{aligned} \quad (15)$$

Количества  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  суть инварианты такого типа, что длина (14) вектора плотность-ток в пространстве-времени является инвариантной. Матрица  $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$ , употребляемая в компактном

выражении  $\Omega_2$ , легко вычисляется, исходя из  $\alpha_i$ ; она эрмитова и выражается:

$$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & +i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ +i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

### 3. Плоская волна в отсутствии поля

Очень полезно рассмотреть случай отсутствия поля ( $V = \vec{A} = 0$ ). В этом случае уравнения Дирака принимают вид:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + m_0 c \right) \Psi_1 - \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_4 - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_3}{\partial z} &= 0 \\ \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + m_0 c \right) \Psi_2 - \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_3 + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_4}{\partial z} &= 0 \\ \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - m_0 c \right) \Psi_3 - \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_2 - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} &= 0 \\ \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - m_0 c \right) \Psi_4 - \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_1 + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_2}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Посмотрим, имеют ли уравнения (17) решением плоскую монохроматическую волну, определяемую через:

$$\Psi = a_i e^{\frac{2\pi i}{\hbar} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \quad (18)$$

Подставляя в (17), мы находим:

$$\begin{aligned} \left( \frac{W}{c} + m_0 c \right) a_1 + (p_x + i p_y) a_4 + p_z a_3 &= 0 \\ \left( \frac{W}{c} + m_0 c \right) a_2 + (p_x - i p_y) a_3 - p_z a_4 &= 0 \\ \left( \frac{W}{c} - m_0 c \right) a_3 + (p_x + i p_y) a_2 + p_z a_1 &= 0 \\ \left( \frac{W}{c} - m_0 c \right) a_4 + (p_x - i p_y) a_1 - p_z a_2 &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Эти линейные и однородные уравнения могут быть удовлетворены одновременно неравными нулю  $a_i$  только в том случае, если детерминант

$$\begin{vmatrix}
 \frac{W}{c} + m_0 c & 0 & p_z & p_x + i p_y \\
 0 & \frac{W}{c} + m_0 c & p_x - i p_y & p_z \\
 p_z & p_x + i p_y & \frac{W}{c} - m_0 c & 0 \\
 p_x - i p_y & -p_z & 0 & \frac{W}{c} - m_0 c
 \end{vmatrix} \quad (20)$$

равен нулю. Несколько длинное вычисление этого детерминанта показывает, что он равен

$$\left( \frac{W^2}{c^2} - m_0^2 c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 \right)^2.$$

Он равен нулю, если  $W$ ,  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  связаны хорошо известным соотношением релятивистской механики:

$$\frac{W^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = m_0^2 c^2. \quad (21)$$

Предположим это соотношение удовлетворенным<sup>1)</sup>. Тогда не только детерминант (20) равен нулю, но и все его субдетерминанты первого порядка точно также равны нулю. Следовательно, мы можем взять произвольно любые две из четырех  $a$ . Возьмем, например, произвольные значения  $A$  и  $B$  соответственно для  $a_3$  и  $a_4$ . Тогда уравнения (19) определяют  $a_1$  и  $a_2$  и мы находим

$$a_1 = - \frac{p_z A + (p_x + i p_y) B}{\frac{W}{c} + m_0 c}; \quad a_2 = - \frac{(p_x - i p_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} \quad (22)$$

Следовательно, мы видим, что плоская волна (18) определена целиком, если мы знаем амплитуды  $A$  и  $B$ .

Мы можем сделать очень интересное замечание в отношении формул (22). В новой механике, как и в прежней релятивистской механике, мы можем сказать, что ньютоново приближение действительно, когда энергия  $W$  несколько превосходит энергию в состоянии покоя  $m_0 c^2$  (небольшие скорости по сравнению со скоростью света).

<sup>1)</sup> Мы принимаем в данном случае, что  $W$  положительна, т. е., что по (21) мы имеем  $\frac{W}{c} = + \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$ .

Далее (глава XX) мы зададимся вопросом, что может значить отрицательное решение  $\frac{W}{c} = - \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$ .



Из (21) выходит, что, если ньютоново приближение справедливо, каждое из количеств  $p_x, p_y, p_z$  — очень мало по сравнению с  $m_0 c$ . Вернемся к формулам (22): когда ньютоново приближение действительно, их знаменатели с большой точностью равны  $2 m_0 c$ , и мы видим, что  $a_1$  и  $a_2$  — очень малы по сравнению с  $A$  и  $B$ . Отсюда выходит, что при ньютоновом приближении функциями  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  можно почти пренебречь по сравнению с  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ . Следовательно, в этом случае мы приходим к проблеме с двумя  $\Psi_i$ , как в нерелятивистской теории Паули. Особенно простым случаем, где ньютоново приближение применимо в точности, является случай электрона в состоянии покоя; тогда функции  $\Psi_i$  суть:

$$\Psi_1 = \Psi_2 = 0; \quad \Psi_3 = A e^{\frac{2\pi i}{h} m_0 c^2 t}; \quad \Psi_4 = B e^{\frac{2\pi i}{h} m_0 c^2 t} \quad (23)$$

Следовательно, в системе галилеевых осей, связанные с электроном волны  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  обязательно равны нулю.

#### 4. Плотность и ток в плоской волне

Мы видим, что в отсутствии поля уравнения Дирака имеют решение:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{p_z A + (p_x + i p_y) B}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{h} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \\ \Psi_2 &= \frac{(p_x - i p_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{h} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \\ \Psi_3 &= A e^{\frac{2\pi i}{h} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \\ \Psi_4 &= B e^{\frac{2\pi i}{h} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \end{aligned} \quad (24)$$

причем постоянные  $W, p_x, p_y, p_z$  связаны соотношением (21). Постоянные  $A$  и  $B$  произвольны при сохранении условия нормировки.

Вычислим плотность  $\rho$  плоской волны (24).

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i^4 \Psi_i^* \Psi_i = A A^* + B B^* + (A A^* + B B^*) \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} = \\ &= (A A^* + B B^*) \left( 1 + \frac{\frac{W^2}{c^2} - m_0^2 c^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right) = (A A^* + B B^*) \frac{2 \frac{W}{c}}{\frac{W}{c} + m_0 c} \end{aligned} \quad (25)$$

Точно таким же образом вычислим  $\rho u_x$  на основании определений (4)

$$\begin{aligned} \rho u_x &= -c(\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1) = \\ &= (A A^* + B B^*) \frac{2 p_x c}{\frac{W}{c} + m_0 c} \end{aligned} \quad (26)$$

это же можно написать, принимая во внимание (25):

$$\rho u_x = \rho \frac{p_x c^2}{W} \quad (27)$$

Следовательно, составляющая  $u_x$  скорости потока вероятности есть

$$u_x = \frac{p_x c^2}{W} \quad (28)$$

Составляющая  $v_x$  скорости электрона в классической концепции такова, что

$$p_x = \frac{m_0 v_x}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{W}{c^2} v_x \quad (29)$$

откуда при сравнении с (28) получается:

$$u_x = v_x \quad (30)$$

Беря составляющие  $y$  и  $z$ , мы получим формулы, аналогичные (26), (27) и (28), и придем к выводу

$$u_y = v_y \quad u_z = v_z \quad (31)$$

Короче говоря, скорость  $\vec{u}$  вероятности в плоской волне везде равна скорости  $\vec{v}$ , которую прежняя корпускулярная концепция приписывала электрону, ассоциируемому с этой плоской волной.

Вполне естественно, что в теории Дирака, как и в волновой механике с одной функцией  $\Psi$ , плоская волна соответствует случаю, где точно известно динамическое состояние частицы ( $p_x, p_y, p_z$ , а следовательно и  $W$ , известны), но где положение совершенно неизвестно.

Выражения плотности электричества и плотности электрического тока здесь суть:

$$\delta = -e\rho; \quad j_x = -e\rho v_x; \quad j_y = -e\rho v_y; \quad j_z = -e\rho v_z, \quad (32)$$

причем  $\rho$  имеет значение (25).

## Глава XIII

### Собственный магнетизм электрона

#### 1. „Пакет вероятности“ в волновой механике

Первоначальная идея Уленбека и Гаудсмита заключалась в том, что они считали электрон небольшим шаром электричества, находящимся во вращении вокруг одного из своих диаметров и, следовательно, обладающим (по крайней мере в своей собственной системе) магнитным моментом, направленным по этому диаметру. Эта концепция не может быть сохранена буквально в новой механике в силу невозможности приписать электрону определенное положение и структуру. Тем не менее, мы увидим, что с помощью введения фиктивной „жидкости вероятности“ в теории Дирака можно получить некоторого рода средний образ электрона, приближающийся к образу Уленбека и Гаудсмита. Для этого нам нужно сначала вспомнить несколько моментов из волновой механики с одной функцией  $\Psi$ .

Когда мы представляем себе движение электрона, происходящее в большом масштабе, например, отклонение электрона магнитным полем, чтобы описать это движение классическим способом, достаточно приписать электрону локализацию, которая была бы совместима с соотношениями неопределенности. Ибо из формул легко видеть, что в обычных условиях опыта длина волны, связанной с электроном, значительно меньше, чем наименьшая длина, какую мы можем измерить непосредственно. Из этого следует, что можно построить небольшую группу волн, образованную путем наложения плоских монохроматических волн с очень близкими частотами, размеры которой в нашем масштабе ничтожны. Следовательно, точное наблюдение электрона может позволить нам, не нарушая соотношений неопределенности, приписать электрону состояние движения и положение, практически точно определенные *в нашем масштабе*. Фиктивная „жидкость вероятности“, плотность которой по определению равна интенсивности  $\Psi\Psi^*$ , в этом случае образует некоторого рода небольшой пакет, внутри которого сила приложенного поля может считаться постоянной. Тогда из теоремы Эренфеста выходит, поскольку пакет довольно точно совмещается со своим центром тяжести, что этот пакет движется как материальная точка, подчиняясь законам классической механики. Так как частица может обнаружиться только внутри пакета и размеры пакета практически ничтожны, все происходит так, как будто бы сама частица подчиняется классическим законам. Так

в грубых чертах совершается переход от прежней к новой механике.

Но здесь нужно заметить, что пакет вероятности не представляет внутренней структуры электрона, как это можно было бы думать с первого взгляда. Электрическая плотность —  $e\rho$  внутри пакета не представляет собой действительной электрической плотности, которая существовала бы внутри электрона, который предполагается имеющим протяжение. В современных теориях электрон предполагают точечным, а плотность —  $e\rho$ , как мы это уже объясняли, представляет собой среднюю электрическую плотность. Следовательно, пакет вероятности представляет собой лишь некоторого рода *средний* образ возможных локализаций электрона. Именно это среднее представление в новой механике больше всего приближается к классической концепции электрона. Точно также не должны ли мы, изучая пакет вероятности в теории Дирака, ожидать появления собственного магнетизма электрона в форме, аналогичной первоначальной идее Уленбека и Гаудсмита? Вскоре мы увидим, что это так и есть.

Вспомним теперь, как можно получить простую модель пакета вероятности в волновой механике с одной функцией  $\Psi$  (Дарвин). Мы предположим, что в первоначальный момент  $t=0$  волна  $\Psi$  имеет форму:

$$\Psi(x, y, z, 0) = a e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0 (v_x x + v_y y + v_z z)} \quad (1)$$

амплитуда которой, имеющая сферическую симметрию вокруг начала координат, есть функция Гаусса от радиуса-вектора<sup>1)</sup>. Амплитуда становится ничтожной, как только расстояние от начала становится небольшим кратным  $\sigma$ : можно сказать, что в первоначальный момент пакет имеет размеры порядка  $\sigma$ . Второй экспоненциальный множитель в (1) представляет собой фазовый множитель плоской волны в момент нуль. Чтобы волна  $\Psi$  была эквивалентна группе волн, количество  $\sigma$ , которым измеряются ее размеры, должно быть малым по сравнению с длиной волны  $\frac{h}{m_0 v}$ .

В силу крайней ничтожности этого последнего количества в нашем масштабе, тем не менее, можно пренебречь количеством  $\sigma$ .

Дарвин изучал распространение пакета формы (1). Он показал<sup>2)</sup>, что в течение достаточно короткого интервала времени пакет в целом перемещается со скоростью  $\vec{v}$  таким образом, что в момент  $t$  мы имеем:

<sup>1)</sup> Чтобы  $\Psi$  была нормированной, необходимо иметь  $|a| = \pi^{-\frac{3}{4}} \sigma^{-\frac{3}{2}}$ .

<sup>2)</sup> Развернутые вычисления можно найти в книге автора: Introduction à l'étude de la Mécanique ondulatoire. Париж. Германи, 1930, глава XIII.

$$\Psi(x, y, z, t) = a e^{-\frac{(x-v_x t)^2 + (y-v_y t)^2 + (z-v_z t)^2}{2\sigma^2}} e^{\frac{2\pi i}{h} [Wt - m_0(v_x x + v_y y + v_z z)]} \quad (2)$$

Это находится в полном согласии с теоремой Эренфеста. Но пакет всегда имеет тенденцию с течением времени прогрессивно расплываться.

Не останавливаясь на этом последнем пункте, мы можем сказать, что сферический пакет Дарвина дает нам некоторого рода образ макроскопического движения электрона. Интересно вычислить плотность и поток вероятности, которые ему соответствуют. Для этого мы должны воспользоваться формулами волновой механики с одной функцией  $\Psi$ :

$$\rho = \Psi \Psi^* \quad \rho \vec{u} = \frac{\hbar}{4\pi i m_0} \left[ \Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi \right] \quad (3)$$

Мы легко находим в первоначальный момент:

$$\rho = a^2 e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{\sigma^2}} \quad \rho \vec{u} = \Psi \Psi^* \vec{v} = \rho \vec{v} \quad (4)$$

откуда

$$\vec{u} = \vec{v}$$

Следовательно, движение вероятности (или среднего электрического распределения) представляет собой конвекцию со скоростью  $\vec{v}$ , и с этой точки зрения пакет Дарвина дает средний макроскопический образ классического электрона. Переноса пакет Дарвина в теорию Дирака, мы увидим, как появится магнитный вращающийся электрон Уленбека и Гаудсмита.

## 2. Сферический пакет вероятности в теории Дирака

Теперь мы перейдем к волновой механике Дирака с четырьмя функциями  $\Psi$ . Мы видели, что мы можем произвольно брать первоначальные амплитуды  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$  и что тогда  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  выводятся из волновых уравнений. Тогда зададимся здесь первоначальными  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$  в форме, подсказываемой (1):

$$\begin{aligned} \Psi_3(x, y, z, 0) &= A e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0(v_x x + v_y y + v_z z)} \\ \Psi_4(x, y, z, 0) &= B e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0(v_x x + v_y y + v_z z)} \end{aligned} \quad (6)$$

Предположим действительным ньютоново приближение. В последней главе мы видели, что это значит. Тогда мы можем за-

менить  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_3}{\partial t}$  и  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_4}{\partial t}$  на  $m_0 c^2$  и два первые уравнения Дирака дают

$$\Psi_1 = \frac{1}{2m_0 c} \frac{h}{2\pi i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_4 + \frac{\partial \Psi_3}{\partial z} \right] \quad (7)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{2m_0 c} \frac{h}{2\pi i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_3 - \frac{\partial \Psi_4}{\partial z} \right]$$

Мы положим

$$P = e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2\tau^2}} e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0 (v_x x + v_y y + v_z z)} \quad (8)$$

Подставляя в (7) значения производных  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ , мы находим

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, y, z, 0) = \\ = -\frac{1}{2m_0 c} \left[ A \left( m_0 v_z + \frac{h}{2\pi i} \frac{z}{\tau^2} \right) + B \left( m_0 (v_x + i v_y) + \frac{h}{2\pi i} \frac{x + iy}{\tau^2} \right) \right] P \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2(x, y, z, 0) = \\ = -\frac{1}{2m_0 c} \left[ A \left( m_0 (v_x + i v_y) + \frac{h}{2\pi i} \frac{x - iy}{\tau^2} \right) - B \left( m_0 v_z + \frac{h}{2\pi i} \frac{z}{\tau^2} \right) \right] P \end{aligned}$$

Эти формулы дают  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  в момент  $0$  для малого значения  $\frac{v}{c}$ .

Функциями  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  можно почти пренебречь по сравнению с  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ , как это можно было бы предвидеть.

Если мы образуем выражение плотности  $\rho = \sum_1^4 \Psi_i^* \Psi_i$ , двумя первыми членами суммы  $\sum$  можно пренебречь по сравнению с двумя последними, и достаточно будет написать:

$$\rho = (A A^* + B B^*) e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\tau^2}} \quad (10)$$

Вполне естественно мы должны иметь (нормировка):

$$(A A^* + B B^*) \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\tau^2}} dx dy dz = 0 \quad (11)$$

Помножая (10) на  $-e$ , мы получаем среднюю электрическую плотность  $\delta$ .

Теперь нужно вычислить составляющие  $\vec{p}$  и  $\vec{i}$ . Здесь нельзя пренебречь ни одним членом, ибо в выражении этих количеств четыре члена представляют собой произведения волновой функ-

ции с небольшим значением на волновую функцию с большим значением. Например, мы имеем:

$$\rho u_x = -c(\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1), \quad (12)$$

что в силу (7) и (9) дает:

$$\begin{aligned} \rho u_x &= \left[ AA^* \left( v_x - \frac{h}{2m_0 \pi} \frac{y}{\sigma^2} \right) + BB^* \left( v_x + \frac{h}{2\pi m_0} \frac{y}{\sigma^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{z}{\sigma^2} (AB^* - BA^*) \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} = \\ &= \rho v_x + \frac{h}{2\pi m_0} \left[ (BB^* - AA^*) \frac{y}{\sigma^2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{z}{\sigma^2} (iAB^* - iBA^*) \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \\ \rho u_x &= \rho v_x + \frac{h}{4\pi m_0} \left[ (AA^* - BB^*) \frac{\partial}{\partial y} - \right. \\ &\quad \left. - (iA^*B - iAB^*) \frac{\partial}{\partial z} \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \quad (13) \end{aligned}$$

Точно также мы находим:

$$\begin{aligned} \rho u_y &= -c(-i\Psi_1^* \Psi_4 + i\Psi_2^* \Psi_3 - i\Psi_3^* \Psi_2 + i\Psi_4^* \Psi_1) = \\ &= \rho v_y + \frac{h}{4\pi m_0} \left[ (AB^* + BA^*) \frac{\partial}{\partial z} - (AA^* - BB^*) \frac{\partial}{\partial x} \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \\ \rho u_z &= c(\Psi_1^* \Psi_3 - \Psi_2^* \Psi_4 + \Psi_3^* \Psi_1 - \Psi_4^* \Psi_2) = \\ &= \rho v_z + \frac{h}{4\pi m_0} \left[ (iA^*B - iAB^*) \frac{\partial}{\partial x} - (AB^* + A^*B) \frac{\partial}{\partial y} \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \quad (13 \text{ бис}) \end{aligned}$$

Чтобы получить составляющие плотности среднего электрического тока, достаточно помножить  $\rho u_x$ ,  $\rho u_y$ ,  $\rho u_z$  на  $-e$ , или, более точно, чтобы получить выражение в электромагнитных единицах, на  $-\frac{e}{c}$ . Тогда мы находим:

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{e}{c} \rho v_x + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left[ (BB^* - AA^*) \frac{\partial}{\partial y} - \right. \\ &\quad \left. - (iAB^* - iA^*B) \frac{\partial}{\partial z} \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \\ j_y &= -\frac{e}{c} \rho v_y + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left[ -(A^*B + AB^*) \frac{\partial}{\partial z} - \right. \\ &\quad \left. (BB^* - A^*A) \frac{\partial}{\partial x} \right] e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\sigma^2}} \quad (14) \end{aligned}$$

$$j_z = -\frac{e}{c} \rho v_z + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left[ (i A B^* - i A^* B) \frac{\partial}{\partial x} - (A^* B - A B^*) \frac{\partial}{\partial y} \right] e^{-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{r^2}}$$

Теперь нужно объяснить эти формулы.

### 3. Доказательство одной из формул электродинамики

Чтобы объяснить формулы (14), нам нужна будет одна из формул электродинамики, доказательство которой мы и дадим в настоящем параграфе.

Известно, что магнитное действие постоянного тока плотности  $\vec{j}$  определяется векторным потенциалом:

$$\vec{A} = \int \int \int \frac{\vec{j} d\tau}{r} \quad (d\tau \text{ элемент объема}) \quad (15)$$

причем магнитное поле выводится из  $\vec{A}$  по формуле:

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A} \quad (16)$$

Если электрический ток считать состоящим из пучка движущихся электронов и если  $\delta$  обозначает среднюю плотность заряда в этом пучке электронов, то нужно положить  $\vec{j} = \delta \vec{v}$ , причем  $\vec{v}$  есть скорость электронов предполагаемая равномерной. Но если электроны являются обладателями магнитного момента, то выражение  $\vec{j}$  необходимо дополнить, принимая во внимание интенсивность намагничивания  $\vec{I}$ , которое тогда имеется в пучке. Мы хотим отыскать, каким образом  $\vec{j}$  зависит от  $\vec{I}$ .

Пусть мы имеем маленький магнит, образованный двумя магнитными массами  $+\mu$  и  $-\mu$ , находящимися одна от другой на расстоянии  $l$ . Если  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  суть направляющие косинусы оси маленького магнита, магнитный момент  $\vec{m}$  магнита имеет составляющие:

$$m_x = \alpha \mu l = \alpha m \quad m_y = \beta m \quad m_z = \gamma m \quad (17)$$

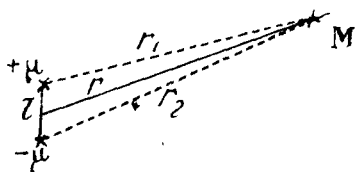
Магнитный потенциал  $\chi$ , образованный магнитом в точке  $M$ , находящейся на расстоянии  $r$  от его центра, есть:

$$\chi = \frac{\mu}{r_1} - \frac{\mu}{r_2} = \mu \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha l + \frac{\partial}{\partial y} \beta l + \frac{\partial}{\partial z} \gamma l \right) = \left( \vec{m} \cdot \text{grad } \frac{1}{r} \right) \quad (18)$$



и поле, образованное в М, имеет составляющие:

$$\begin{aligned} H_x &= -\frac{\partial \chi}{\partial x} = -\left( m_x \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial x^2} + m_y \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial x \partial y} + m_z \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial x \partial z} \right) \\ H_y &= -\frac{\partial \chi}{\partial y} = -\left( m_x \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial y \partial x} + m_y \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial y^2} + m_z \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial y \partial z} \right) \\ H_z &= -\frac{\partial \chi}{\partial z} = -\left( m_x \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial z \partial x} + m_y \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial z \partial y} + m_z \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (19)$$



Фиг. 6

Мы покажем, что векторный потенциал  $\vec{A}$ , ротором которого должно являться поле  $H$ , определяемое (19), дается формулой:

$$\vec{A} = \left[ \vec{m} \cdot \text{grad} \frac{1}{r} \right] \quad (20)$$

причем скобки обозначают некоторое произведение. Действительно, для  $H_x$  мы имеем:

$$\begin{aligned} H_x = (\text{rot } A)_x &= \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left( m_x \frac{\partial \frac{1}{r}}{\partial y} - m_y \frac{\partial \frac{1}{r}}{\partial x} \right) - \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left( m_z \frac{\partial \frac{1}{r}}{\partial x} - m_x \frac{\partial \frac{1}{r}}{\partial z} \right) = -m_y \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial y \partial x} - m_z \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial z \partial x} + \\ &+ m_x \left[ \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \frac{1}{r}}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

откуда, в силу хорошо известного соотношения  $\Delta \frac{1}{r} = 0$ , мы выводим для  $H_x$  первое выражение (19). Точно таким же обра-

зом мы найдем выражения (19) для  $H_y$  и  $H_z$ . Следовательно, это и есть векторный потенциал (20), который соответствует магнитному полю (19).

Предположим теперь, что мы имеем дело не с одним маленьким магнитом момента  $\vec{m}$ , а с намагниченным телом, имеющим протяжение, интенсивность намагничения  $\vec{I}$  которого мы знаем в любой точке. Мы должны заменить в последних формулах  $\vec{m}$  на  $\vec{I}d\tau$  и проинтегрировать. Это дает:

$$\vec{A} = \iiint \left[ \vec{I} \cdot \text{grad} \frac{1}{r} \right] d\tau \quad (22)$$

Предположим вектор  $\vec{I}$  на границах намагниченного тела равным нулю. Тогда интегрирование по частям позволяет нам написать:

$$\begin{aligned} A_x &= \iiint \left( I_y \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{r} - I_z \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{r} \right) d\tau = \\ &= \iiint_V \frac{1}{r} \left( \frac{\partial I_z}{\partial y} - \frac{\partial I_y}{\partial z} \right) d\tau = \iiint_V \frac{(\text{rot } I)_x}{r} d\tau \end{aligned} \quad (23)$$

(где  $V$  — объем намагниченного тела) и мы имеем аналогичные формулы для  $A_y$  и  $A_z$ . Тогда мы получаем векторное соотношение:

$$\vec{A} = \iiint_V \frac{\text{rot } \vec{I}}{r} d\tau \quad (24)$$

Если, наконец, мы имеем дело с телом, одновременно наэлектризованным и намагниченным, находящимся в равномерном движении со скоростью  $\vec{v}$ , векторный потенциал, созданный этим телом, в силу (15) и (24), будет:

$$\vec{A} = \iiint_V \frac{\vec{\delta v} + \text{rot } \vec{I}}{r} d\tau \quad (25)$$

Следовательно, он равен векторному потенциалу, который был бы создан током с плотностью:

$$\vec{j} = \vec{\delta v} + \text{rot } \vec{I} \quad (26)$$

Формула (26) послужит нам для объяснения формул (14).

#### 4. Интерпретация формул (14)

Вернемся к формулам (14) и определим вектор  $I$ , задаваясь следующими значениями для его составляющих:

$$\begin{aligned} I_x &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (-A^*B - AB^*) e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}} \\ I_y &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (iAB^* - iA^*B) e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}} \\ I_z &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (BB^* - AA^*) e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}} \end{aligned} \quad (27)$$

Вектор  $\vec{I}$  — действителен (ибо  $I_x = I_x^*$  и т. д.) и равен нулю на границах пакета вероятности, т. е. в данном случае в бесконечности. При помощи этого вектора  $\vec{I}$  мы можем написать формулы (14) в векторной форме:

$$\vec{j} = -\frac{e}{c} \rho \vec{v} + \text{rot } \vec{I} \quad (28)$$

Эта формула (28) представляет громадный интерес, так как, сравнивая ее с формулой (26), мы видим, что пакет вероятности, среднее макроскопическое представление электрона, не может отождествляться с простым шаром заряда  $-e$ , находящимся в движении со скоростью  $\vec{v}$ , а с шаром, одновременно наэлектризованным и намагниченным, с интенсивностью намагничения, равной  $\vec{I}$  в каждой из его точек.

Общий магнитный момент пакета есть вектор  $\vec{M}$ , который мы получаем, интегрируя вектор  $\vec{I}$ . Принимая во внимание (27) и условие нормировки (11), мы находим для составляющих  $M$ <sup>1)</sup>:

$$\begin{aligned} M_x &= \iiint I_x d\tau = \\ &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (-A^*B - AB^*) \iiint e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}} d\tau = \\ &= -\frac{eh}{4\pi m_0 c} \frac{A^*B + AB^*}{AA^* + BB^*} \\ M_y &= \iiint I_y d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \frac{i(AB^* - A^*B)}{AA^* + BB^*} \\ M_z &= \iiint I_z d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \frac{BB^* - AA^*}{AA^* + BB^*} \end{aligned} \quad (29)$$

<sup>1)</sup> В действительности  $M_x, M_y, M_z$  только средние значения, как это мы точно показали в предыдущей главе. Следовательно, вместо  $M_x$  мы должны были бы писать  $\overline{M}_x$  и т. д.

Следовательно, длина вектора  $\vec{\mathfrak{M}}$  есть:

$$|\mathfrak{M}| = \sqrt{\mathfrak{M}_x^2 + \mathfrak{M}_y^2 + \mathfrak{M}_z^2} =$$

$$= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \sqrt{\frac{(A^*B + AB^*)^2 - (A^*B - AB^*)^2 + (BB^* - AA^*)^2}{(AA^* + BB^*)^2}} =$$

$$= \frac{eh}{4\pi m_0 c}. \quad (30)$$

Таким образом, пакет имеет магнитный момент, равный магнетону Бора.

Возьмем теперь формулу (13) и попробуем ее написать в виде:  $\rho u_x = \rho v_x + \rho v_x'$ . Нам приходится положить:

$$v_x' = \frac{h}{2\pi m_0 \rho} \left[ (BB^* - AA^*) \frac{y}{\sigma^2} - (iAB^* - iA^*B) \frac{z}{\sigma^2} \right] e^{\frac{x^2 + y^2 + z^2}{\sigma^2}} =$$

$$= \frac{h}{2\pi m_0 \sigma^2} \left[ \frac{BB^* - AA^*}{AA^* + BB^*} y - \frac{iAB^* - iA^*B}{AA^* + BB^*} z \right], \quad (31)$$

принимая во внимание (10). Точно также мы положим:

$$v_y' = \frac{h}{2\pi m_0 \sigma^2} \left[ \frac{-(AB^* + A^*B)}{AA^* + BB^*} z - \frac{(BB^* - AA^*)}{AA^* + BB^*} x \right]$$

$$v_z' = \frac{h}{2\pi m_0 \sigma^2} \left[ \frac{iAB^* - iA^*B}{AA^* + BB^*} x - \frac{-(AB^* + A^*B)}{AA^* + BB^*} y \right]. \quad (31 \text{ бис})$$

Тогда мы полагаем:

$$\omega_x = \frac{h}{2\pi m_0 \sigma^2} \frac{(AB^* + A^*B)}{AA^* + BB^*}; \quad \omega_y = \frac{-h}{2\pi m_0 \sigma^2} \frac{iAB^* - iA^*B}{AA^* + BB^*};$$

$$\omega_z = \frac{-h}{2\pi m_0 \sigma^2} \frac{BB^* - AA^*}{AA^* + BB^*}. \quad (32)$$

Формулы (31) и (31 бис) принимают вид:

$$v_x' = \omega_y z - \omega_z y; \quad v_y' = \omega_z x - \omega_x z; \quad v_z' = \omega_x y - \omega_y x. \quad (33)$$

Так как по самому способу, каким мы ввели  $\vec{v}'$ , получается  $\vec{u} = \vec{v} + \vec{v}'$ , мы видим, что скорость вероятности есть сумма скорости  $\vec{v}$ , перемещения совокупности пакета и *внутренней* скорости  $\vec{v}'$ , происходящей в силу вращения совокупности, определяемого скоростью вращения  $\omega$  с составляющими  $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ . Эта скорость вращения представляется вектором  $\omega$ ,

проходящим через центр пакета, параллельным  $\vec{\mathcal{M}}$  (ибо мы имеем  $\omega_x : \omega_y : \omega_z = \mathcal{M}_x : \mathcal{M}_y : \mathcal{M}_z$ ) и имеющим длину

$$|\omega| = \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2} = \frac{h}{2\pi m_0 \sigma^2} \quad (34)$$

Это внутреннее вращение пакета объясняет происхождение магнитного момента  $\mathcal{M}$ : оно тем скорее, чем меньше пакет. Это легко объясняется, поскольку магнитный момент  $\vec{\mathcal{M}}$  должен всегда быть равным магнетону Бора. Таким образом, пакет вероятности в теории Дирака дает своего рода средний макроскопический образ магнитного вращающегося электрона.

**Тензор**

**„плотность электрического и магнитного момента“**

**1. Магнитный момент электрона Дирака в ньютоновом приближении**

В последней главе, изучая сферический пакет вероятности, определенный при помощи волновых функций (6) и (9), мы пришли к вектору  $\vec{I}$ , определяемому при помощи формул (27), вектору, который представляет интенсивность намагничивания пакета, т. е. плотность магнитного момента. Если мы примем во внимание формулы (6), мы можем написать формулы (27), дающие составляющие  $\vec{I}$  в виде:

$$\begin{aligned} I_x &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (-\Psi_3^* \Psi_4 - \Psi_3 \Psi_4^*) \\ I_y &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (i\Psi_3 \Psi_4^* - i\Psi_4 \Psi_3^*) \\ I_z &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} (\Psi_4^* \Psi_4 - \Psi_3^* \Psi_3). \end{aligned} \quad (1)$$

В этой новой форме выражения составляющих вектора  $\vec{I}$  действительны для каждой волны Дирака в ньютоновом приближении (т.е. когда  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  ничтожны по сравнению с  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ ), а не только для сферического пакета вероятности, рассмотренного в последней главе.

Тогда составляющие среднего магнитного момента электрона Дирака получаются после интегрирования выражений (1) по всему пространству. Следовательно, мы имеем

$$\begin{aligned} \bar{M}_x &= \iiint I_x d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \iiint (-\Psi_3^* \Psi_4 - \Psi_4^* \Psi_3) d\tau \\ \bar{M}_y &= \iiint I_y d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \iiint (-i\Psi_3^* \Psi_4 + i\Psi_4^* \Psi_3) d\tau \\ \bar{M}_z &= \iiint I_z d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \iiint (\Psi_4^* \Psi_4 - \Psi_3^* \Psi_3) d\tau. \end{aligned} \quad (2)$$

Не нужно забывать, что все эти формулы имеют только статистическое значение. Если мы рассматриваем очень большое число электронов, находящихся в том же самом состоянии, определяемом теми же самыми функциями  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ , и если мы для каждого из этих электронов измеряем, например, составляющую

вдоль оси  $x$  собственного магнитного момента, мы получим различные результаты в зависимости от случая, но среднее значение полученных результатов в совокупности будет  $\overline{M}_x$  формулы (2). Это и есть применение общих идей новой механики; в частности мы будем помнить, что в силу примечания к главе VI параграфа 3, выражения (1) не являются настоящими физическими плотностями в прежнем смысле, а количествами, которые необходимо интегрировать, чтобы получить средние значения (2).

Мы должны несколько остановиться на третьей формуле (2). Мы знаем, что, если измерить собственный магнитный момент электрона параллельно оси  $z$ , мы должны обязательно найти  $\pm$  магнетон Бора. Уравнение Дирака особенную роль представляет оси  $z$  именно потому, что вероятности этих двух предположений должны выразиться просто при помощи  $\Psi_i$ . Тогда, если мы посмотрим на формулы (2), мы увидим, что вероятность

найти для  $M_z$  значение  $+\frac{eh}{4\pi m_0 c}$  есть  $\int \int \int \Psi_4^* \Psi_4 d\tau$ , в то время как отыскать  $-\frac{eh}{4\pi m_0 c}$  есть  $\int \int \int \Psi_3^* \Psi_3 d\tau$ . Это находится

в полном согласии с идеями Паули, к которым возвращается теория Дирака, как только мы принимаем, как в данном случае, ньютоново приближение. Среднее значение (2)  $M_z$  представляет средний результат измерения  $M_z$  для большого числа электронов в состоянии, определяемом при помощи  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ .

Выражения составляющих  $\vec{I}$ , т. е. выражения (1), инвариантны по отношению ко всякому преобразованию пространственных координат. Это значит, что, если мы переходим от одной системы прямоугольных координат  $x y z$  к другой системе прямоугольных координат  $x' y' z'$ , составляющие  $\vec{I}$  в новой системе выражаются при помощи новых волновых функций  $\Psi'_i$ , точно также как прежние составляющие  $\vec{I}$  выражались через (1) при помощи  $\Psi_i$ . Мы не приводим здесь доказательства, так как оно очень легко.

Но эта инвариантность не имеет больше места для преобразования Лоренца. Здесь проявляется характер ньютонового приближения в выражениях (1). Чтобы получить релятивистскую инвариантность, нужно принять во внимание функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  и ввести три составляющие интенсивности намагничивания  $\vec{I}$  среди шести составляющих антисимметричного тензора второго порядка, как это мы увидим дальше.

## 2. Средний магнитный момент плоской волны в ньютоновом приближении

Рассмотрим плоскую волну, определенную в ньютоновом приближении при помощи двух волновых функций:

$$\Psi_3 = A e^{\frac{2\pi i}{h} [w t - m_0 v_x x - m_0 v_y y - m_0 v_z z]}$$

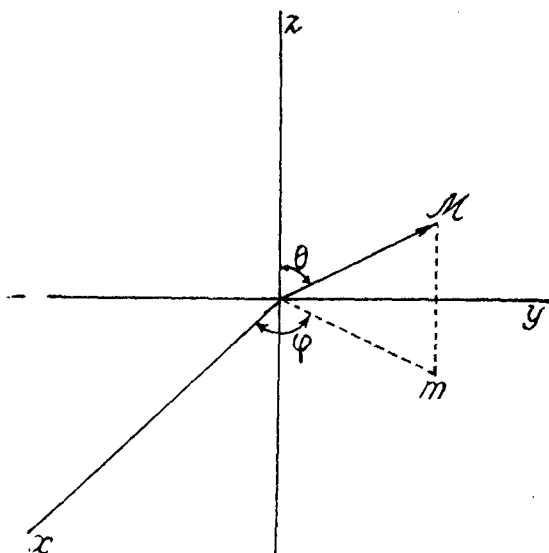
$$\Psi_4 = B e^{\frac{2\pi i}{h} [w t - m_0 v_x x - m_0 v_y y - m_0 v_z z]} \quad (3)$$

Каковы же составляющие среднего магнитного момента? Это легко найти при помощи формул (2), принимая во внимание условие нормировки<sup>1)</sup>.

$$\bar{M}_x = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} \frac{-A^* B - A B^*}{A A^* + B B^*}$$

$$\bar{M}_y = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} \frac{i A B^* - i A^* B}{A A^* + B B^*} \quad (4)$$

$$\bar{M}_z = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} \frac{B B^* - A A^*}{A A^* + B B^*}$$



Фиг. 7

<sup>1)</sup> При написании условия нормировки может возникнуть затруднение, так как область интегрирования — бесконечна и, строго говоря, здесь следовало бы ввести собственные дифференциалы. Но практически можно избежать этой трудности, полагая с самого начала область конечной с объемом  $V$ . Тогда условие нормировки здесь примет вид:

$$\iiint (|\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2) d\tau = (A A^* + B B^*) V = 1$$

и из (2) мы выводим, например:

$$\bar{M}_x = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} (-A^* B - B^* A) V = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} \frac{-A^* B - B^* A}{A A^* + B B^*}$$

Так как этот результат точен, то как бы ни был велик  $V$ , формулы (4) оказываются доказанными.



Формулы (4) совпадают с формулами (29) предыдущей главы. Мы могли бы этого ожидать, ибо упомянутые формулы (29) действительны, каково бы ни было значение  $\sigma$  в формулах (6), и, если мы заставим  $\sigma$  стремиться к бесконечности, то сферический пакет предыдущей главы будет стремиться к плоской волне (3).

Отметим направление вектора  $\vec{M}$  в системе сферических координат  $\theta$  и  $\varphi$ .

Тогда мы имеем:

$$\vec{M}_x : \vec{M}_y : \vec{M}_z = (-A^*B - AB^*) : (iAB^* - iA^*B) : (BVB^* - AA^*) = \\ = \sin \theta \cos \varphi : \sin \theta \sin \varphi : \cos \theta,$$

откуда легко вывести:

$$\left(-\frac{B}{A} - \frac{B^*}{A^*}\right) : i\left(-\frac{B}{A} + \frac{B^*}{A^*}\right) : \left(\frac{B}{A} - \frac{B^*}{A^*} - 1\right) = \\ = 2 \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \cos \varphi : 2 \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \sin \varphi : \left(\operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2} - 1\right). \quad (6)$$

Мы удовлетворим уравнениям (6), полагая:

$$-\frac{B}{A} = \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \quad (7)$$

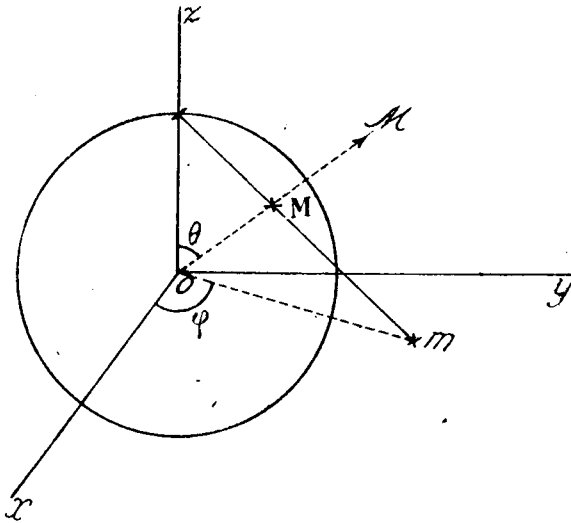
и комплексное соотношение (7), эквивалентное двум действительным соотношениям, показывает нам, как ориентация  $\vec{M}$  связана со значением отношения  $\frac{B}{A}$ .

Эту связь можно выразить следующим образом (Дарвин, Иордан): рассмотрим шар с радиусом равным единице; ориентация вектора  $\vec{M}$  определяется координатами  $\theta$  и  $\varphi$  точки  $M$ , в которой этот вектор пересекает шар. Спроектируем эту точку  $M$  стереографически на плоскость экватора так, чтобы центр проекции находился на северном полюсе.

Точка проекции  $m$  имеет координаты

$$x = \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \cos \varphi \quad y = \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \sin \varphi. \quad (8)$$

Если мы рассматриваем плоскость  $xy$ , как плоскость одной комплексной переменной, аффикс точки  $m$  есть  $\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}$  и по (7) равен  $-\frac{B}{A}$ . Отсюда получаем следующий результат: отношение



Фиг. 8

—  $\frac{B}{A}$  связано с направлением магнитного момента тем же самым соотношением, которое связывает аффикс точки в плоскости комплексной переменной с направлением, которое ему соответствует в шаре при стереографическом проектировании.

### 3. Тензор „плотность магнитного и электрического момента“

Мы уже видели, что выражения (1) обладают инвариантностью по отношению к преобразованиям пространственных координат, но не обладает ею для преобразований Лоренца. Тем не менее, можно отыскать шесть квадратичных комбинаций четырех функций  $\Psi_i$ , которые преобразуются при изменении галилеевых координат, как составляющие антисимметричного тензора второго порядка. Вот их выражения, которые все действительны:

$$\begin{aligned} \mu_{xx} = I_x &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 - \Psi_3^* \Psi_4 - \Psi_4^* \Psi_3 \right) = \\ &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_{xy} = I_y &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( i \Psi_1^* \Psi_2 - i \Psi_2^* \Psi_1 - i \Psi_3^* \Psi_4 + i \Psi_4^* \Psi_3 \right) = \\ &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot \alpha_3 \alpha_1 \alpha_4 \Psi_k. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mu_{xy} = I_z &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( \Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_2^* \Psi_2 - \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4 \right) = \\
 &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot x_1 x_2 x_4 \Psi_k \\
 \mu_{xt} = J_x &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( i \Psi_1^* \Psi_4 - i \Psi_2^* \Psi_3 - i \Psi_3^* \Psi_2 - i \Psi_4^* \Psi_1 \right) = \\
 &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot x_1 x_t \Psi_k \\
 \mu_{yt} = J_y &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( -\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 - \Psi_4^* \Psi_1 \right) = \\
 &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot x_2 x_t \Psi_k \\
 \mu_{zt} = J_z &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( i \Psi_1^* \Psi_3 - i \Psi_2^* \Psi_4 - i \Psi_3^* \Psi_1 + i \Psi_4^* \Psi_2 \right) = \\
 &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot x_3 x_t \Psi_k. \tag{9}
 \end{aligned}$$

При помощи 6 количеств (9) и полагая соотношения антисимметрии  $\mu_{zy} = -\mu_{yz}$  и т. д., можно составить антисимметричную таблицу с 4 строками и 4 столбцами:

0	$\mu_{xy}$	$\mu_{xz}$	$\mu_{xt}$	
$\mu_{yx}$	0	$\mu_{yz}$	$\mu_{yt}$	
$\mu_{zx}$	$\mu_{zy}$	0	$\mu_{zt}$	
$\mu_{tx}$	$\mu_{ty}$	$\mu_{tz}$	0	

(10)

Легко проверить, что таблица (10) определяет антисимметричный тензор второго порядка. Для этого достаточно проверить, для каждого ли из трех простых преобразований, на которые можно разложить общее преобразование Лоренца,  $\mu_{ij}$  преобразуются согласно схемы:

$$\mu_{ij} = \sum_{kl} \mu_{kl} \frac{dx'_k}{dx_k} \frac{dx'_l}{dx_l} \tag{11}$$

|| Мы опускаем эту длинную неинтересную проверку.

Если мы можем пренебречь волновыми функциями  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , что возможно, когда действительно ньютоново приближение, количества  $\mu_{yz}$ ,  $\mu_{zx}$  и  $\mu_{xy}$  соответственно сокращаются до  $I_x$ ,  $I_y$  и  $I_z$  формулы (1). Таким образом, вполне естественно ду-

мать, что эти три составляющие  $\mu$  суть три составляющие среднего намагничивания  $\vec{I}$  в их точных релятивистских выражениях.

Но что представляют собой три составляющих  $\mu_{xt}$ ,  $\mu_{yt}$  и  $\mu_{zt}$ ? В теории относительности, чтобы определить антисимметричный тензор второго порядка, мы должны объединить магнитное и электрическое поле. В своей статье о магнитном электроне до теории Дирака Френкель показал необходимость дополнения магнитного момента электрона электрическим моментом<sup>1</sup>). Вот как рассуждал Френкель. В прежней теории магнитного электрона он является частицей, обладающей собственным магнитным моментом; в системе координат, где электрон находится в движении, вокруг него должно создаваться электрическое поле под влиянием его магнитного момента, ибо точно так же как в движении электрический заряд эквивалентен току и создает вокруг себя магнитное поле, в движении магнитный полюс создает вокруг себя электрическое поле. Следовательно, в движении магнитный электрон должен обладать электрическим моментом и, чтобы удовлетворить требованиям принципа относительности, три составляющие электрического момента должны объединиться с тремя составляющими магнитного момента так, чтобы образовать антисимметричный тензор второго порядка. Таким образом, мы приходим к рассмотрению  $\mu_{xt}$   $\mu_{yt}$   $\mu_{zt}$ , как трех составляющих плотности электрического момента.

Шесть количеств (9) позволяют образовать 2 инварианта, т. е. это значит, что существует две комбинации  $\mu_{ij}$ , значение которых одинаково во всякой системе координат. Эти две комбинации следующие:

$$I^2 - J^2 = I_x^2 + I_y^2 + I_z^2 - J_x^2 - J_y^2 - J_z^2; \\ (\vec{I} \cdot \vec{J}) = I_x J_x + I_y J_y + I_z J_z. \quad (12)$$

Действительно, введем уже встречавшиеся в главе XII параграфа 3 два инварианта:

$$\Omega_1 = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 - \Psi_3^* \Psi_3 - \Psi_4^* \Psi_4 = \sum_k \Psi_k^* \cdot \alpha_k \Psi_k \\ \Omega_2 = i \Psi_1^* \Psi_3 + i \Psi_2^* \Psi_4 - i \Psi_3^* \Psi_1 - i \Psi_4^* \Psi_2 = \\ = \sum_k \Psi_k^* \cdot \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k \quad (13)$$

Легко проверить соотношения:

$$I^2 - J^2 = \left( \frac{eh}{4\pi m_0 c} \right)^2 (\Omega_1^2 - \Omega_2^2); (\vec{I} \cdot \vec{J}) = \left( \frac{eh}{4\pi m_0 c} \right)^2 \Omega_1 \Omega_2 \quad (14)$$

которые показывают инвариантность обоих количеств. Впрочем, с тензорной точки зрения эта инвариантность очевидна, ибо, с

<sup>1</sup> Zeitschrift für Physik, 37, 4—5, стр. 243.

одной стороны,  $I^2 - J^2$  является „длиной“ пространственно-временного тензора, а, с другой стороны, скалярное, произведение

$$(\vec{I} \cdot \vec{J}) = I_{yz} J_{zt} + I_{zx} J_{yt} + I_{xy} J_{zt}$$

которое, очевидно, является инвариантом по отношению к преобразованиям пространственных координат и для простого преобразования Лоренца тоже не изменяется, как это легко проверить. Отсюда следует его инвариантность для общего преобразования Лоренца.

Как и раньше, мы можем заметить, что выражения (9) не являются физическими плотностями в прежнем смысле слова: это только количества, которые нужно проинтегрировать по пространству, чтобы получить средние значения составляющих магнитного момента и электрического момента электрона. Эти два *средние* момента, которые мы будем обозначать через  $\bar{\mathfrak{M}}$  и  $\bar{\mathfrak{P}}$ , даются формулами

$$\bar{\mathfrak{M}} = \iiint \vec{I} d\tau; \quad \bar{\mathfrak{P}} = \iiint \vec{J} d\tau, \quad (15)$$

причем векторы  $\vec{I}$  и  $\vec{J}$  определяются их составляющими (9). Вполне естественно, что значения составляющих  $\bar{\mathfrak{M}}_x$  и т. д. следует интерпретировать статистически. Итак формула:

$$\bar{\mathfrak{M}}_z = \iiint I_z d\tau = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \iiint (\Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_2^* \Psi_2 - \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4) d\tau \quad (16)$$

означает, что измерение  $\mathfrak{M}_z$  может дать значение  $+\frac{eh}{4\pi m_0 c}$  с вероятностью

$$\iiint (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_4^* \Psi_4) d\tau$$

и значение  $-\frac{eh}{4\pi m_0 c}$  с вероятностью

$$\iiint (\Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3) d\tau$$

В силу условия нормирования  $\Psi_k$  сумма обеих вероятностей равна единице.

Рассматривая прежний чисто корпускулярный образ электрона, Френкель<sup>1)</sup> показал, что магнитный момент  $\bar{\mathfrak{M}}$  электрона в системе, где его скорость есть  $\vec{v}$ , должен быть связан со своим

<sup>1)</sup> Там же.

электрическим моментом  $\vec{\mathfrak{P}}$  в той же системе при помощи соотношения:

$$\vec{\mathfrak{P}} = \left[ \vec{\mathfrak{M}} \cdot \frac{\vec{v}}{c} \right]. \quad (17)$$

Мы убедимся на примере, что соотношение Френкеля остается точным и в теории Дирака.

#### 4. Простой пример: плоская монохроматическая волна

Воспользуемся формулами главы XII, параграфа 3, беря для простоты направление распространения плоской волны за ось  $z$ . Тогда  $p_x = p_y = 0$  и четыре  $\Psi_i$  имеют форму:

$$\begin{aligned} \Psi_3 &= A e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(Wt - p_z z)}; \quad \Psi_4 = B e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(Wt - p_z z)} \\ \Psi_1 &= -\frac{p_z A}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(Wt - p_z z)}; \quad \Psi_2 = \frac{p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(Wt - p_z z)} \end{aligned} \quad (18)$$

При такой форме  $\Psi_i$  формулы (9) легко дают:

$$\begin{aligned} I_x &= -\frac{e\hbar}{4\pi m_0 c} (A^*B + AB^*) \left( 1 + \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right); \\ J_x &= \frac{e\hbar}{4\pi m_0 c} \cdot \frac{2ip}{\frac{W}{c} + m_0 c} (AB^* - A^*B) \\ &= i \frac{e\hbar}{4\pi m_0 c} (AB^* - BA^*) \left( 1 - \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right); \\ J_y &= \frac{e\hbar}{4\pi m_0 c} \cdot \frac{2p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c} (A^*B + AB^*) \quad (19) \\ I_z &= \frac{e\hbar}{4\pi m_0 c} (BB^* - AA^*) \left( 1 - \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right); \quad J_z = 0. \end{aligned}$$

Без всякого труда мы убеждаемся, что:

$$(\vec{I} \cdot \vec{J}) = 0. \quad (20)$$

К тому же это является следствием второй формулы (14), ибо инвариант  $\Omega_2$  в данном конкретном случае<sup>1)</sup> есть нуль.

Исследование формул (19) дает соотношения:

$$J_x = I_y \frac{2 p_z \left( \frac{W}{c} + m_0 c \right)}{\left( \frac{W}{c} + m_0 c \right)^2 + p_z^2} = I_y \frac{v_z}{c};$$

$$J_y = -x \frac{2 p_z \left( \frac{W}{c} + m_0 c \right)}{\left( \frac{W}{c} + m_0 c \right)^2 + p_z^2} = -I_x \frac{v_z}{c}; \quad J_z = 0. \quad (21)$$

Интегрируя соотношения (21) по всему пространству, чтобы ввести составляющие  $\vec{M}$  и  $\vec{P}$ , мы видим, что соотношение (17) Френкеля доказано (ибо  $v_x = v_y = 0$ ).

Когда действительно ньютоново приближение, отношение  $\frac{p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c}$  почти точно равно  $\frac{m_0 v_z}{2 m_0 c} = \frac{1}{2} \frac{v_z}{c}$  и квадрат его ничто-

жен по сравнению с единицей. Тогда для  $I_x, I_y, I_z$  мы находим значения, которые получаем, исходя из формул (27) предыдущей главы, заставляя  $\sigma$  стремиться к бесконечности. Результат, которого можно было ожидать.

На основании общих формул (19) и (20) можно сделать следующие замечания: вектор  $\vec{J}$  нормален к плоскости, определяемой вектором  $\vec{I}$  и вектором  $\vec{p}$ ; если скорость стремится к скорости света, т. е. если  $p_z$  стремится к  $\frac{W}{c}$  (которая тогда во много раз больше  $m_0 c$ ), трехгранный угол, образованный тремя векторами  $\vec{p}$ ,  $\vec{I}$  и  $\vec{J}$ , стремится стать прямоугольным, в то время как длины  $\vec{I}$  и  $\vec{J}$  стремятся стать равными.

<sup>1)</sup> Действительно, этот инвариант можно, очевидно, вычислить в какой-либо галилеевой системе, например, в системе, где скорость электрона равна нулю; в такой системе  $\Psi_1 = \Psi_2 = 0$  и (13) дает  $\Omega_2 = 0$ .

## Матрицы и первые интегралы в теории Дирака. Собственный момент вращения электрона

### 1. Собственные значения и функции уравнений Дирака

Собственные значения и функции уравнений Дирака легко определяются по аналогии с теорией с одной функцией  $\Psi$ .

Когда внешнее поле независимо от времени, существуют монокроматические решения уравнений Дирака, т. е. решения, где четыре  $\Psi_k$  зависят от времени одним и тем же экспоненциальным множителем  $e^{\frac{2\pi i}{h} W t}$ . Тогда четыре  $\Psi_k$  удовлетворяют уравнениям:

$$\left[ \left( \frac{W}{c} + \frac{eV}{c} \right) + x_1 P_1 + x_2 P_2 + x_3 P_3 + x_4 m_0 c \right] \Psi_k = 0; \quad (\kappa = 1, 2, 3, 4) \quad (1)$$

Значения постоянной  $W$ , для которых существует, по меньшей мере, одна совокупность  $\Psi_k$ , конечных, однозначных, непрерывных и равных нулю на бесконечности, суть „собственные значения“ уравнения (1). Следовательно, одному собственному значению  $W_n$  соответствует, по крайней мере, одна совокупность<sup>1)</sup> собственных функций  $\Psi_{1,n}$ ,  $\Psi_{2,n}$ ,  $\Psi_{3,n}$  и  $\Psi_{4,n}$ . Мы даем по два индекса каждой из  $\Psi_k$ , причем первый индекс введен теорией Дирака, а второй это тот, который характеризует соответствующее собственное значение.

Следовательно, четыре функции  $\Psi_{k,n}$ , соответствующие собственному значению  $W_n$ , по определению удовлетворяют уравнениям:

$$\left[ \left( \frac{W_n}{c} + \frac{eV}{c} \right) + \sum_1^3 x_i P_i + x_4 m_0 c \right] \Psi_{k,n} = 0; \quad \kappa = 1, 2, 3, 4 \quad (2)$$

В виду того, что четыре функции  $\Psi_{k,n}$  можно умножить на одну и ту же произвольную постоянную и они при этом не перестанут удовлетворять уравнениям (2), мы видим, что каждое собственное решение определено только с точностью до постоянного комплексного множителя. Модуль этой постоянной опре-

<sup>1)</sup> Совокупность 4 собственных функций  $\Psi_{k,n}$  может быть названа „собственным решением“ уравнения (1).



делается при помощи условия нормировки, которое, как мы уже знаем, нужно написать в виде:

$$\int \sum_k^4 \Psi_{k,n}^* \Psi_{k,n} d\tau = 1. \quad (3)$$

Мы теперь покажем, во-первых, что все собственные значения  $W_n$  действительны, во-вторых, что, если собственные функции  $\Psi_{k,n}$  и  $\Psi_{k,m}$  соответствуют различным собственным значениям  $W_n$  и  $W_m$ , мы имеем условие ортогональности:

$$\int \sum_k^4 \Psi_{k,m}^* \Psi_{k,n} d\tau = 0. \quad (4)$$

Действительно, если функции  $\Psi_{k,n}$  удовлетворяют уравнениям (2), функции  $\Psi_{k,m}^*$  удовлетворяют уравнениям:

$$\left| \left( -\frac{W_m^*}{c} + \frac{eV}{c} \right) + \sum_i^3 \alpha_i^* P_i^* + \alpha_4^* m_0 c \right| \Psi_{k,m}^* = 0; \quad (\kappa = 1, 2, 3, 4) \quad (5)$$

Помножим (2) на  $\Psi_{k,m}^*$  и (5) на  $\Psi_{k,n}$ ; просуммируем по индексу  $k$  и вычтем; получаем:

$$\begin{aligned} \sum_k^4 \left[ \frac{W_n - W_m^*}{c} \Psi_{k,m}^* \Psi_{k,n} + \Psi_{k,m}^* \sum_i^3 \alpha_i P_i \cdot \Psi_{k,n} - \right. \\ \left. - \Psi_{k,n} \sum_i^3 \alpha_i^* P_i^* \cdot \Psi_{k,m}^* + m_0 c (\Psi_{k,m}^* \alpha_4 \Psi_{k,n} + \right. \\ \left. + \Psi_{k,n} \alpha_4^* \Psi_{k,m}^*) \right] = 0 \quad (6) \end{aligned}$$

Далее мы покажем, что, если  $F$  есть линейный оператор, действующий на координаты (а не на индекс  $k$  Дирака), мы имеем:

$$\sum_k^4 \Psi_{k,m}^* \cdot F \alpha_i \Psi_{k,n} = \sum_k^4 F \Psi_{k,n} \cdot \alpha_i^* \Psi_{k,m}^*; \quad (i = 1, 2, 3). \quad (7)$$

Действительно, учитывая эрмитность  $\alpha_i$ , мы находим:

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa,m}^* F \alpha_i \Psi_{\kappa,n} &= \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa,m}^* \cdot F \sum_j^4 (\alpha_i)_{\kappa,j} \Psi_{j,n} = \\ &= \sum_{j,\kappa}^4 \Psi_{\kappa,m}^* (\alpha_i)_{\kappa,j} F \Psi_{j,n} = \sum_{j,\kappa}^4 \Psi_{\kappa,m}^* (\alpha_i^*)_{j,\kappa} F \Psi_{j,n} = \\ &= \sum_j^4 F \Psi_{j,n} \cdot \sum_{\kappa}^4 (\alpha_i^*)_{j,\kappa} \Psi_{\kappa,m}^* = \sum_j^4 F \Psi_{j,n} \cdot \alpha_i^* \Psi_{j,m}^*. \quad (8) \end{aligned}$$

Что и требовалось доказать.

Приравнивая  $F$  единице, как частный случай, мы сначала выводим из (7):

$$\sum_1^4 \Psi_{k,m}^* \alpha_i \Psi_{k,n} = \sum_1^4 \Psi_{k,n} \cdot \alpha_i^* \Psi_{k,m}^* \quad (9)$$

Таким образом, в (6) члены с  $eA_x$ ,  $eA_y$ ,  $eA_z$  и  $m_0 c$  исчезают. Следовательно, уравнение (6) приводится к:

$$\sum_1^4 \left[ \frac{W_n - W_m^*}{c} \Psi_{k,m}^* \Psi_{k,n} - \frac{h}{2\pi i} \Psi_{k,m}^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha_1 + \frac{\partial}{\partial y} \alpha_2 + \frac{\partial}{\partial z} \alpha_3 \right) \Psi_{k,n} - \frac{h}{2\pi i} \Psi_{k,n} \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha_1^* + \frac{\partial}{\partial y} \alpha_2^* + \frac{\partial}{\partial z} \alpha_3^* \right) \Psi_{k,m}^* \right] = 0 \quad (10)$$

По (7) мы имеем:

$$\sum_1^4 \Psi_{k,m}^* \frac{\partial}{\partial x} \alpha_1 \Psi_{k,n} = \sum_1^4 \frac{\partial \Psi_{k,n}}{\partial x} \cdot \alpha_1^* \Psi_{k,m}^* \text{ и т. д.} \quad (11)$$

и формула (10) принимает вид

$$\sum_1^4 \left[ \frac{W_n - W_m^*}{c} \Psi_{k,m}^* \cdot \Psi_{k,n} - \frac{h}{2\pi i} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (\Psi_{k,n} \cdot \alpha_1^* \Psi_{k,m}^*) + \frac{\partial}{\partial y} (\Psi_{k,n} \cdot \alpha_2^* \Psi_{k,m}^*) + \frac{\partial}{\partial z} (\Psi_{k,n} \alpha_3^* \Psi_{k,m}^*) \right\} \right] = 0 \quad (12)$$

При интегрировании по всему пространству член между фигурными скобками дает нуль, так как  $\Psi_k$  равны нулю на бесконечности, и остается

$$\frac{W_n - W_m^*}{c} \int \sum_1^4 \Psi_{k,m}^* \Psi_{k,n} d\tau = 0 \quad (13)$$

Если мы сначала возьмем  $n = m$ , то из (13) выводим, что  $W_n^* = W_n$ , для каждого значения  $n$ , и это значит, что все  $W_n$  действительны. Если затем мы возьмем  $n \neq m$ , памятуя, что по предположению  $W_n \neq W_m$ , из (13) мы выводим формулу ортогональности (4). Таким образом, теорема доказана.

Соотношение ортогональности, вообще говоря, не имеет места для двух собственных решений, соответствующих одному и тому же собственному значению (случай вырождения). Но тогда собственные решения, которые соответствуют одному и тому же собственному значению, определены только с точностью до линейного преобразования, и мы всегда можем выбрать эти собственные решения так, чтобы они были ортогональны.

Случай сплошных спектров собственных значений дает место тем же замечаниям, что и в волновой механике с одной функцией  $\Psi$ . Вообще говоря, параллелизм обеих теорий здесь полный. Тем не менее, нужно отметить одно различие: в формулах, в которых вводится интегрирование по пространству, как, например, формулы нормировки и ортогональности (3) и (4), в теории Дирака необходимо производить суммирование по индексу  $k$ . Наличие этого суммирования станет вполне естественным, когда мы разовьем синтетическую точку зрения, по которой индекс  $k$  считают некоторого рода дополнительной прерывной переменной (см. главу XVI).

## 2. Матрицы и первые интегралы в теории Дирака

В волновой механике с одной функцией  $\Psi$  каждому линейному и эрмитовому оператору  $A$  соответствует матрица, элементы которой определяются по формуле:

$$A_{mn} = \int_D \Psi_m^* A(\Psi_n) d\tau, \quad (14)$$

где  $d\tau$  — элемент объема области  $D$ , в которой определена функция  $\Psi_n$ . Тогда говорят, что оператор  $A$  является первым интегралом для рассматриваемой проблемы, если все  $A_{mn}$  независимы от времени, и мы видели, что, полагая

$$L = H - \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial t},$$

необходимым и достаточным условием для того, чтобы  $A$  был первым интегралом, есть

$$LA - AL = 0. \quad (15)$$

Как же мы перенесем эти определения в теорию Дирака?

Чтобы определить матричные элементы, мы примем во внимание замечание в конце последнего параграфа, т. е. мы будем накладывать на интегрирование, фигурирующее в прежнем определении (14), суммирование по индексу функции  $\Psi_k$  Дирака. Следовательно, матричные элементы, соответствующие линейному и эрмитовому оператору <sup>1)</sup>  $A$ , определяются из соотношения:

$$A_{mn} = \int_D \sum_k \Psi_{k,m}^* A(\Psi_{k,n}) d\tau. \quad (16)$$

Мы всегда будем говорить, что  $A$  есть первый интеграл, если все  $A_{mn}$  независимы от времени. Чтобы отыскать условие, ко-

<sup>1)</sup> Естественно, что в теории Дирака оператор может действовать в одинаковой мере на индекс  $k$ , как и на координаты.

торое выражает, что  $A$  есть первый интеграл, мы напишем символическое уравнение Дирака в сжатой форме:

$$L(\Psi) = 0 \quad (17)$$

где:

$$L = \left( P_4 + \sum_1^3 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right) \quad (18)$$

и мы заметим, что, полагая:

$$H = \left[ eV + \sum_1^3 c \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c^2 \right], \quad (19)$$

мы можем написать

$$L = \frac{1}{c} \left( -H + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right); \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(\Psi). \quad (20)$$

Оператор  $H$ , определенный через (19), есть гамильтонов оператор в теории Дирака. Оператор  $H$  — эрмитовый, т. е. он удовлетворяет условию:

$$\int_D \sum_1^4 \Psi_{\kappa m}^* H(\Psi_{\kappa n}) d\tau = \int_D \sum_1^4 \Psi_{\kappa n} H^*(\Psi_{\kappa m}^*) d\tau \quad (21)$$

для всех значений  $m$  и  $n$ . Уравнение (21) — очевидное обобщение условия эрмитности механики с одной  $\Psi$ . Оно просто выражает, что по определению (16) мы имеем  $H_{mn} = H_{nm}^*$ . Формула (21) легко доказывается, если принять во внимание эрмитность  $\alpha_i$  и свойство  $\Psi_{\kappa n}$  быть равным нулю на границах  $D^1$ .

<sup>1)</sup> Чтобы доказать это, в (21) замещают оператор  $H$  его выражением (19) и проверяют, действительно ли соотношение (21) для каждого члена. Для членов, содержащих  $V$ , доказательство — прямое. Для членов, содержащих  $A_x$ ,  $A_y$  и  $A_z$  мы имеем, например:

$$\sum_1^4 e A_x \sum_1^4 (\alpha_1^*)_{kj} \Psi_{\kappa n} = \sum_1^4 e A_x \Psi_{j, m}^* \sum_1^4 (\alpha_1)_{j, \kappa} \Psi_{\kappa n} = \sum_1^4 \Psi_{j, m}^* e A_x \alpha_1 \Psi_{j, m}$$

в силу эрмитности  $\alpha_i$ , и соотношение (21), таким образом, доказано для этих членов. Остаются такие члены, как

$$\sum_1^4 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \alpha_1^* \Psi_{\kappa m}^* \Psi_{\kappa n}$$

Раньше всего мы имеем, всегда в силу эрмитности  $\alpha_i$ :

$$\frac{h}{2\pi i} \sum_1^4 \sum_{k, j} \frac{\partial}{\partial x} [(\alpha_1^*)_{\kappa, j} \Psi_{j, m}^*] \Psi_{\kappa n} = \frac{h}{2\pi i} \sum_1^4 \frac{\partial \Psi_{j, m}^*}{\partial x} \sum_1^4 (\alpha_1)_{j, \kappa} \Psi_{\kappa n}$$

Чтобы выразить, что  $A$  есть первый интеграл, мы напишем

$$\frac{\partial A_{mn}}{\partial t} = \int_D \sum_k^4 \left[ \Psi_{k,m}^* A \left( \frac{\partial \Psi_{k,n}}{\partial t} \right) + \Psi_{k,m}^* \frac{\partial A}{\partial t} (\Psi_{k,m}) + \right. \\ \left. + \frac{\partial \Psi_{k,m}^*}{\partial t} A (\Psi_{k,n}) \right] d\tau = 0 \quad (22)$$

Затем, так как мы имеем  $L(\Psi_{k,n}) = 0$  и  $L^*(\Psi_{k,m}^*) = 0$ , мы заменим производные  $\frac{\partial \Psi_{k,n}}{\partial t}$  и  $\frac{\partial \Psi_{k,m}^*}{\partial t}$  соответственно на  $\frac{2\pi i}{h} H(\Psi_{k,n})$  и  $-\frac{2\pi i}{h} H^*(\Psi_{k,m}^*)$ , а это нам дает:

$$\frac{dA_{mn}}{dt} = \int_D \sum_k^4 \left[ \frac{2\pi i}{h} \Psi_{k,m}^* A H(\Psi_{k,n}) + \right. \\ \left. + \Psi_{k,m}^* \frac{\partial A}{\partial t} (\Psi_{k,n}) - \frac{2\pi i}{h} H^*(\Psi_{k,m}^*) A (\Psi_{k,n}) \right] d\tau. \quad (23)$$

Это выражение может быть преобразовано при помощи формулы:

$$\int_D \sum_k^4 H^*(\Psi_{k,m}^*) A (\Psi_{k,n}) d\tau = \int_D \sum_k^4 \Psi_{k,m}^* H A (\Psi_{k,n}) d\tau, \quad (24)$$

которая доказывается как (21). Перенося (24) в (23), мы находим

$$\frac{dA_{m,n}}{dt} = \int_D \sum_k^4 \Psi_{k,m}^* \left[ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} (A H - H A) \right] \Psi_{k,n} d\tau. \quad (25)$$

Из (22) мы делаем вывод, что необходимым и достаточным условием для того, чтобы  $A$  был первым интегралом, есть:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} (A H - H A) = 0, \quad (26)$$

ибо  $\Psi_{k,n}$  образуют полную систему.

затем, после интегрирования по частям, так как  $\Psi_{k,n}$  равны нулю на границах  $D$ :

$$\frac{h}{2\pi i} \int_D \sum_j^4 \frac{\partial \Psi_{j,m}^*}{\partial x} \sum_k^4 (a_1)_{j,k} \Psi_{k,n} d\tau = - \\ - \frac{h}{2\pi i} \int_D \sum_j^4 \Psi_{j,m}^* \sum_k^4 (a_1)_{j,k} \frac{\partial \Psi_{k,n}}{\partial x} = \int_D \sum_k^4 \Psi_{k,m}^* \left( -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \tau_1 \Psi_{k,n}$$

Что и требовалось доказать.

Условие (26) мы можем написать еще иначе, заметив, что для какой-нибудь функции  $f$  мы имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} A(f) = \frac{\partial A}{\partial t}(f) + A\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right), \quad (27)$$

откуда символически:

$$\frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \cdot A = A \cdot \frac{\partial}{\partial t}. \quad (28)$$

Следовательно, заменяя оператор  $\frac{\partial A}{\partial t}$  в (26) на его значение (28), мы имеем:

$$LA - AL \equiv 0 \quad (29)$$

в силу (20).

Условия (26) и (29) имеют ту же форму, что и аналогичные условия механики с одной  $\Psi$ , но с другим определением операторов  $L$  и  $H$ .

Мы заметим, что, вводя определение (19),  $H$  из уравнения (1) может быть написано в виде

$$H(\Psi_k) = W\Psi_k. \quad (30)$$

Итак, собственные значения  $W_k$ , определенные в параграфе 1, суть собственные значения гамильтонового оператора, т. е. собственные значения энергии.

### 3. Примеры первых интегралов. Собственный момент вращения электрона

Сначала мы проанализируем, в каком случае гамильтонов оператор, соответствующий энергии, является первым интегралом. Для этого нужно, чтобы:

$$LH - HL = \frac{1}{c} \left( -H + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) H - H \frac{1}{c} \left( -H + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \equiv 0, \quad (31)$$

или проще

$$\frac{\partial}{\partial t} H - H \cdot \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \equiv 0. \quad (32)$$

Следовательно, необходимым и достаточным условием для того, чтобы энергия была первым интегралом, всегда является, чтобы внешнее поле (определяемое здесь 4 функциями  $V$ ,  $A_x$ ,  $A_y$ ,  $A_z$ ) было независимо от времени. Это теорема сохранения энергии в механике Дирака.

Точно также легко видеть, что, если векторный потенциал равен нулю и если скалярный потенциал не зависит от одной из координат, скажем  $x$ , составляющая, соответствующая коли-

честву движения  $\left(p_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}\right)$ , есть первый интеграл. Это теорема сохранения количества движения.

Гораздо интереснее изучение теоремы сохранения момента количества движения в теории Дирака. Действительно, мы видели, что в волновой механике с одной функцией  $\Psi$  момент вращения вокруг оси  $z$ , соответствующий оператору:

$$M_z = xp_y - yp_x = \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (33)$$

есть первый интеграл, если силовое поле обладает цилиндрической симметрией вокруг оси  $z$ . Мы увидим, что этого результата не существует в механике с четырьмя функциями  $\Psi$ , и мы будем искать, чем он должен быть замещен.

Сначала проверим, что в поле, образованном скалярным потенциалом с цилиндрической симметрией  $V(\rho, z)$ , где

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2},$$

$M_z$  не является первым интегралом в механике Дирака. Для этого мы должны показать, что  $M_z$  не коммутирует с  $L$ . С самого начала очевидно, что  $M_z$  коммутирует с  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ ,  $\alpha_3 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}$  и  $\alpha_4 m_0 c$ ; он коммутирует также с членом  $\frac{e}{c} V$ , ибо мы имеем (в операторном виде):

$$V \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) - \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) V \equiv x \frac{\partial V}{\partial y} - y \frac{\partial V}{\partial x} \quad (34)$$

это равно нулю, так как по предположению  $V$  зависит только от

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Но зато  $M_z$  не коммутирует с членами с  $-\alpha_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$  и с  $-\alpha_2 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}$ , ибо мы имеем

$$\begin{aligned} & \left( -\alpha_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_2 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) - \\ & - \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( -\alpha_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_2 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right) = \\ & = \frac{h^2}{4\pi^2} \left( \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

Итак мы вообще имеем:

$$L M_z - M_z L = \frac{h^2}{4\pi^2} \left( \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (36)$$

и  $M_z$  не является первым интегралом.

Тогда мы рассмотрим оператор:

$$N_z = M_z - \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} \quad (37)$$

Этот оператор — эрмитовый, ибо произведение двух матриц  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , которые эрмитовы и антикоммутируют, — антиэрмитово, а частное от деления на  $i$  — эрмитово. Мы покажем, что в данном случае  $N_z$  есть первый интеграл. Для этого возьмем разность:

$$L \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} - \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} L.$$

Члены с  $\frac{\partial}{\partial t}$ ,  $V$  и  $\alpha_4 m_0 c$ , очевидно, коммутируют с  $\alpha_1 \alpha_2$ ; то же самое происходит и с членом  $\alpha_3 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}$  в силу свойств  $\alpha_i$ . Следовательно, остается:

$$\begin{aligned} & L \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} - \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} L = \\ & = \frac{h^2}{8\pi^2} \left[ \alpha_1 \alpha_1 \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \alpha_1 \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} - \alpha_1 \alpha_2 \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \alpha_2 \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} \right]. \quad (38) \end{aligned}$$

Так как  $\alpha_1 \alpha_1 = \alpha_2 \alpha_2 = 1$ ,  $\alpha_2 \alpha_1 \alpha_2 = -\alpha_1$  и  $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_1 = -\alpha_2$ , мы находим:

$$L \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} - \alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i} L = \frac{h^2}{4\pi^2} \left( \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) = L M_z - M_z L. \quad (39)$$

Из этого мы выводим соотношение

$$L N_z - N_z L \equiv 0 \quad (40)$$

и видим, что  $N_z$  есть первый интеграл.

Мы можем применить рассуждение, аналогичное предыдущему, для составляющих с индексами  $x$  и  $y$ , переставляя оси. Тогда мы видим, что в теории Дирака общий момент вращения электрона есть вектор с составляющими:

$$N_x = M_x + S_x \quad N_y = M_y + S_y \quad N_z = M_z + S_z \quad (41)$$



причем операторы, соответствующие  $M_x$  и т. д., суть:

$$M_x = \frac{h}{2\pi i} \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right); \quad M_y = \frac{h}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right);$$

$$M_z = \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (42)$$

$$S_x = -\alpha_2 \alpha_3 \frac{h}{4\pi i}; \quad S_y = -\alpha_3 \alpha_1 \frac{h}{4\pi i}; \quad S_z = -\alpha_1 \alpha_2 \frac{h}{4\pi i}.$$

$M_x, M_y, M_z$  суть составляющие „орбитального“ момента вращения электрона, и вполне естественно это приводит нас к тому, что мы считаем  $S_x, S_y, S_z$  составляющими собственного момента вращения электрона, т. е. „спина“.

#### 4. Явное определение $N_z$ . Знак собственной массы для волн $\Psi_k$

Очень интересно явное вычисление оператора  $N_z$ , соответствующего привилегированной оси  $z$ , и посмотреть, какие получатся результаты при его последовательном применении к четырем  $\Psi_k$ .

Исходя из известных нам значений  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , легко вычислить при помощи правила умножения матриц произведение  $\alpha_1 \alpha_2$  и мы находим:

$$\alpha_1 \alpha_2 = \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +i \end{pmatrix} \quad (43)$$

Отсюда мы легко выводим:

$$N_z(\Psi_1) = M_z(\Psi_1) + \frac{h}{4\pi} \Psi_1$$

$$N_z(\Psi_2) = M_z(\Psi_2) - \frac{h}{4\pi} \Psi_2$$

$$N_z(\Psi_3) = M_z(\Psi_3) + \frac{h}{4\pi} \Psi_3$$

$$N_z(\Psi_4) = M_z(\Psi_4) - \frac{h}{4\pi} \Psi_4 \quad (44)$$

Итак, из формул (44) мы видим, что для волн с нечетным индексом собственный момент вращения есть  $+\frac{h}{4\pi}$ , а для волн с четным индексом  $-\frac{h}{4\pi}$ .

Напишем среднее значение  $N_z$ . Мы имеем:

$$\begin{aligned} \bar{N}_z &= \int \int \int \sum_k^4 \Psi_k^* N_z(\Psi_k) d\tau \\ &= \bar{M}_z + \frac{h}{4\pi} \int \int \int [\Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_3^* \Psi_3 - \Psi_4^* \Psi_4] d\tau. \end{aligned} \quad (45)$$

Эту формулу нужно объяснить так: собственный момент вращения электрона вдоль оси  $z$  может принять только два значения  $\frac{h}{4\pi}$  и  $-\frac{h}{4\pi}$ , причем вероятность первой возможности есть

$$\int \int \int (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_3^* \Psi_3) d\tau,$$

а второй

$$\int \int \int [\Psi_2^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_4] d\tau.$$

Тогда сравним формулу (45) с формулой (16) главы XIV, которая дает средний магнитный момент электрона вдоль  $oz$ :

$$M_z = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \int \int \int (\Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_2^* \Psi_2 - \Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4) d\tau. \quad (46)$$

Мы видим, что можно привести в соответствие:

$$\text{волне } \Psi_3 \text{ магнитный момент } - \frac{eh}{4\pi m_0 c},$$

$$\text{момент вращения } + \frac{h}{4\pi},$$

$$\text{волне } \Psi_4 \text{ магнитный момент } + \frac{eh}{4\pi m_0 c},$$

$$\text{момент вращения } - \frac{h}{4\pi}.$$

Мы уже видели, что для этих двух волн, которые являются преобладающими в ньютоновом приближении, отношение двух моментов равно  $-\frac{e}{m_0 c}$ , как и следовало ожидать в силу двойного магнетизма вращающегося электрона<sup>1)</sup>.

Но для волн  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  мы получаем неожиданный результат. Действительно, по (45) и (46), нужно привести в соответствие:

<sup>1)</sup> Отношение  $-\frac{e}{m_0 c}$  действительно является двойным нормальным отношением, данным формулой (7) главы IV.

$$\text{волне } \Psi_1 \text{ магнитный момент } + \frac{e h}{4 \pi m_0 c},$$

$$\text{момент вращения } + \frac{h}{4 \pi},$$

$$\text{волне } \Psi_2 \text{ магнитный момент } - \frac{e h}{4 \pi m_0 c},$$

$$\text{момент вращения } - \frac{h}{4 \pi}.$$

откуда отношение двух моментов  $+\frac{e}{m_0 c}$ , значение, которое отличается своим знаком от ожидавшегося значения.

Откуда происходит эта аномалия? Чтобы это понять, заметим сначала, что все происходит так, как если бы в том, что касается волн  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , собственная масса электрона была  $-m_0$  вместо  $m_0$ . Это хорошо видно из тех же уравнений Дирака:

$$\left( P_4 + \sum_i^4 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right) \Psi_k = 0 \quad (k = 1, 2, 3, 4), \quad (47)$$

если учесть явную форму матрицы  $\alpha_4$ :

$$\alpha_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (48)$$

Член с  $m_0$  имеет различный знак, с одной стороны, в двух первых уравнениях (47), а с другой стороны, в двух последних.

Это можно выразить словами как: в теории Дирака собственная масса  $m_0$  прежней механики замещена оператором  $-\alpha_4 m_0$ . Так как:

$$\begin{aligned} -\alpha_4 m_0 \Psi_1 &= -m_0 \Psi_1; & -\alpha_4 m_0 c \Psi_2 &= -m_0 \Psi_2; \\ -\alpha_4 m_0 c \Psi_3 &= m_0 \Psi_3; & -\alpha_4 m_0 c \Psi_4 &= m_0 \Psi_4, \end{aligned} \quad (49)$$

то очевидно, что волнам  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$  соответствует масса  $m_0$ , в то время как волнам  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  соответствует масса  $-m_0$ . Если теперь читатель вспомнит рассуждения, которые предшествовали формуле (32) в главе X, он лучше поймет это явление в свете того, что здесь сказано.

## Систематическое резюме полученных результатов

1. Индекс функции  $\Psi_k$ , рассматриваемый как переменная

До сих пор, излагая теорию Дирака, мы говорили, что она предполагает существование четырех волновых функций  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$  четырех переменных  $xuzt$ . Мы можем стать на другую точку зрения и сказать, что существует *одна* функция  $\Psi$ , зависящая от четырех непрерывных переменных  $xuzt$ , которые способны принимать все действительные значения от  $-\infty$  до  $+\infty$ , и пятой переменной  $\zeta$ , переменной „спина“, могущей принимать только четыре значения: 1, 2, 3, 4. Это заставляет считать индекс  $k$  функции  $\Psi_k$  прерывной переменной с четырьмя возможными значениями.

Операторы  $\alpha_i$  действуют на прерывную переменную  $\zeta$ , в то время как операторы, вроде, например,  $p_x$ , действуют на непрерывные переменные. Можно рассматривать операторы, которые действуют сразу на четыре переменных<sup>1)</sup>  $xuz\zeta$ , таков гамильтонов оператор  $H$  Дирака, определяемый по формуле (19) предыдущей главы.

Теперь мы напишем уравнение Дирака в виде:

$$\left( P_4 + \sum_1^3 \alpha_i P_i + \alpha_4 m_0 c \right) \Psi(x, y, z, t, \zeta) = 0. \quad (1)$$

До сих пор мы рассматривали это уравнение, как символическое уравнение, резюмирующее четыре различные уравнения. Теперь мы можем считать его единственным уравнением распространения во времени в пространстве четырех переменных  $xuz\zeta$ .

Интегрирования, которые в волновой механике „без спина“ производились в пространстве с тремя измерениями  $xuz$ , здесь мы должны производить в пространстве  $xuz\zeta$ . Это объясняет нам основную причину следующего уже указывавшегося прежде явления: все формулы волновой механики, где фигурирует интегрирование по пространству, в теории Дирака должны быть дополнены суммированием от 1 до 4 по индексу  $k$ .

В действительности это суммирование  $\sum_k^4$  соответствует свое-

<sup>1)</sup> Хотя теория Дирака в некотором смысле является релятивистской, время играет в ней роль, отличную от четырех прочих переменных  $xuz\zeta$ ; мы вернемся к этому несколько позже.

го рода интегрированию по прерывной переменной  $\zeta$ , и нам часто будет удобно символически представлять его при помощи интеграла  $\int \dots d\zeta$ . Так, например, условие нормировки волновой механики без спина:

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, y, z, t) \cdot \Psi(x, y, z, t) dx dy dz = 1 \quad (2)$$

в теории Дирака становится:

$$\begin{aligned} & \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa}^* \cdot \Psi_{\kappa} dx dy dz = \\ & = \int \int \int \int \Psi^*(x, y, z, t, \zeta) \cdot \Psi(x, y, z, t, \zeta) dx dy dz d\zeta = 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Точно также новая точка зрения позволяет легко видеть, как нужно в теории Дирака писать разложение в ряд по собственным функциям. Пусть мы имеем, например, функцию  $f(x, y, z, t, \zeta)$  пяти переменных  $x, y, z, t, \zeta$ . Она эквивалентна четырем функциям  $f_1, f_2, f_3, f_4$  четырех непрерывных переменных  $x, y, z, t$ . Предположим, что нам известна система собственных функций гамильтонового оператора; мы уже условились обозначать собственную функцию этой системы совокупностью четырех функций  $\Psi_{1,m} \Psi_{2,m} \Psi_{3,m} \Psi_{4,m}$ , где второй индекс  $m$  характеризует соответствующее собственное значение. С нашей новой точки зрения мы должны представить совокупность четырех функций  $\Psi_{\kappa,m}$  при помощи единственной функции  $\Psi_m(x, y, z, t, \zeta)$ .

Тогда разложение функции  $f(x, y, z, t, \zeta)$  по полной системе функций  $\Psi_m(x, y, z, t, \zeta)$  вполне естественно изобразится:

$$f(x, y, z, t, \zeta) = \sum_m c_m \Psi_m(x, y, z, t, \zeta); \quad (4)$$

это эквивалентно четырем соотношениям:

$$f_{\kappa}(x, y, z, t) = \sum_m c_m \Psi_{\kappa,m}(x, y, z, t) \quad (\kappa = 1, 2, 3, 4). \quad (5)$$

Итак мы видим, что каждая из четырех составляющих  $f_{\kappa}$  разлагается по собственным функциям  $\Psi_{\kappa,m}$  с тем же индексом  $\kappa$ ; кроме того, коэффициенты разложения одни и те же для четырех составляющих. Это положение, которое может показаться не очевидным, если  $\kappa$  рассматривать как индекс, становится, наоборот, очевидным, если мы рассуждаем так, как мы это делаем, замещая индекс  $\kappa$  прерывной переменной  $\zeta$ .

## 2. Выражение общих принципов в теории Дирака

Введение прерывной переменной  $\zeta$  позволяет сейчас же отыскать, каким образом общие принципы волновой механики переносятся в теорию Дирака.

Сначала мы примем, что каждой наблюдаемой физической величине, приписываемой электрону, соответствует оператор  $A$ , который вообще может действовать на четыре переменных  $x, y, z, \zeta$ . Этот оператор всегда должен быть эрмитовым в пространстве  $x, y, z, \zeta$ , т. е. мы должны иметь

$$\begin{aligned} & \iiint \int f^*(x, y, z, t, \zeta) A g(x, y, z, t, \zeta) dx dy dz d\zeta = \\ & = \iiint \int g(x, y, z, t, \zeta) A^* f(x, y, z, t, \zeta) dx dy dz d\zeta. \end{aligned} \quad (6)$$

Собственные значения оператора  $A$  определяются, как значения постоянной  $a$ , для которых уравнение:

$$A \varphi(x, y, z, t, \zeta) \equiv a \varphi(x, y, z, t, \zeta) \quad (7)$$

имеет, по крайней мере одно, везде конечное непрерывное однозначное решение по  $x, y, z$  для каждого из четырех значений  $\zeta$ . Эти собственные значения, вообще говоря, функции времени, — действительны, а две собственные функции  $\varphi_m$  и  $\varphi_n$ , соответствующие двум различным собственным значениям  $a_m$  и  $a_n$ , — ортогональны в пространстве  $x, y, z, \zeta$ , т. е. мы имеем:

$$\iiint \int \varphi_m^*(x, y, z, t, \zeta) \varphi_n(x, y, z, t, \zeta) dx dy dz d\zeta = 0. \quad (8)$$

Эти результаты доказываются тем же самым способом, который мы употребляли в главе V параграфа 4, каждый раз дополняя интегрирования по  $x, y, z$  суммированием по  $\zeta$ . Кроме того, мы всегда будем предполагать, что собственные функции  $\varphi_n$  нормированы по условию:

$$\iiint \int \varphi_n^*(x, y, z, t, \zeta) \varphi_n(x, y, z, t, \zeta) dx dy dz d\zeta = 1. \quad (9)$$

После этого легко выразить в теории Дирака основные принципы новой механики.

Первый из этих принципов выразится без всяких изменений, если мы скажем, что измерение величины  $A$ , произведенное в момент  $t$ , обязательно дает в результате одно из собственных значений оператора  $A$  в этот момент  $t$ .

Чтобы выразить второй принцип, мы сначала предположим, что оператор  $A$  есть „полный“ оператор, т. е., что он охватывает все четыре переменных  $x, y, z, \zeta$ ; кроме того, мы предпо-

лагаем его также невырожденным, т. е. не имеющим кратных собственных значений. Тогда пусть  $\Psi(x, y, z, t, \zeta)$  будет волновой функцией электрона. Эта волновая функция может разлагаться по собственным функциям оператора  $A$  в форме

$$\Psi(x, y, z, \zeta, t) = \sum_m c_m \varphi_m(x, y, z, \zeta), \quad (10)$$

причем  $c_m$  — комплексные постоянные, вообще функции времени. Тогда второй принцип утверждает, что  $|c_m(t)|^2$  есть вероятность, что измерение величины  $A$  даст собственное значение  $a_m$ , соответствующее  $\varphi_m$ .

Если  $A$  обладает кратными собственными значениями, одной и той же  $a_m$  соответствует несколько  $\varphi_m$ . Тогда вероятность значения  $a_m$  для величины  $A$  равна сумме квадратов модулей коэффициентов, соответствующих этим  $\varphi_m$  в разложении  $\Psi$ .

Если оператор  $A$  неполный, т. е. действует только на некоторые из переменных  $x, y, z, \zeta$ , то соответствующие  $\varphi_m$  зависят только от этих переменных, а коэффициенты  $c_m$  в разложении  $\Psi$  по  $\varphi_m$  зависят от переменных, которые не фигурируют в  $A$ . В этом случае для того, чтобы получить вероятность собственного значения  $a_m$ , нужно проинтегрировать количество  $|c_m|^2$  по всей области тех переменных  $x, y, z, \zeta$ , от которых зависит  $c_m$ . Например, если  $A$  есть оператор, как одна из  $\alpha_i$ , действующий только на переменную  $\zeta$ , эти собственные функции имеют форму  $\varphi_m(\zeta)$  и мы имеем:

$$\Psi(x, y, z, t, \zeta) = \sum_m c_m(x, y, z, t) \varphi_m(\zeta). \quad (11)$$

Тогда вероятность, что величина  $A$  будет иметь значение  $a_m$ , дается

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int \int [c_m(x, y, z, t)]^2 dx, dy, dz.$$

Применение этого результата мы увидим в следующем параграфе.

Приняв эти принципы, мы видим, что среднее значение величины  $A$ , как мы это уже приняли, равно:

$$\bar{A} = \int \int \int \int \Psi^* A(\Psi) dx dy dz d\zeta = \int \int \int \sum_k \Psi_k^* A(\Psi_k) d\tau, \quad (12)$$

ибо, если в этом выражении заменить  $\Psi$  и  $\Psi^*$  на их разложения по собственным функциям  $A$ , мы легко увидим, что оно

равно сумме произведений каждого собственного значения на его вероятность. Следовательно, количество  $\sum_1^4 \Psi_k^* A(\Psi_k)$  может быть названо „плотностью среднего значения“ для величины  $A$ , но, как это мы указывали в главе VI, параграф 3, эта плотность не может считаться имеющей тот же физический смысл, что и плотности классических теорий. Тем не менее, мы вскоре увидим, что плотности этого рода, соответствующие операторам  $\alpha_i$  и эрмитовым операторам, образованным произведениями  $\alpha_i$ , действительны и обладают тензорным характером, что позволяет приблизить их к некоторым величинам классической физики.

Вспомним, наконец, что матричный элемент с индексами  $ij$ , соответствующий оператору  $A$ , в механике Дирака должен быть определен по формуле

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \int \int \int \int \Psi_i^*(x, y, z, t, \zeta) A(\Psi_j(x, y, z, t, \zeta)) dx dy dz d\zeta = \\ &= \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_1^4 \Psi_{k,i}^* A(\Psi_{k,j}) d\tau \end{aligned} \quad (13)$$

и он равен коэффициенту  $\Psi_j(x, y, z, t, \zeta)$  в разложении функции  $A(\Psi_j)$  по собственным функциям гамильтонового оператора.

В предыдущем изложении мы явно предполагали, что спектр оператора  $A$  чисто дискретный. То, что мы говорили в главах V и VI о сплошных спектрах, позволит читателю без труда увидеть, как написанные выше формулы изменяются, если существуют собственные значения, образующие непрерывную последовательность.

### 3. Пример: собственные значения и функции оператора

$$\mathfrak{M}_z = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} i \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4$$

Как пример оператора  $A$ , действующего только на переменную спина, мы возьмем оператор  $\mathfrak{M}_z = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} i \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4$ , который мы поставили в соответствие составляющей  $z$  собственного магнитного момента электрона (см. глава X в конце).

Для краткости мы положим:

$$B = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} = \text{магнетон Бора.} \quad (14)$$



Уравнение, которое определяет собственные значения и функции оператора  $\mathfrak{M}_z$  по (7), есть:

$$B \sum_{jk}^4 i(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3)_{jk} \varphi_j = a \varphi_j \quad (j=1, 2, 3, 4). \quad (15)$$

Учитывая значение матричных элементов  $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3$ , мы находим для четырех значений переменной  $\zeta$ :

$$\begin{aligned} B \varphi(1) &= +a \varphi(1); & B \varphi(2) &= -a \varphi(2); & B \varphi(3) &= -a \varphi(3); \\ B \varphi(4) &= +a \varphi(4). \end{aligned} \quad (16)$$

Эти уравнения имеют не равное тождественно нулю решение  $\varphi(\zeta)$  только в том случае, если  $a = \pm B$ . Следовательно, оператор  $\mathfrak{M}_z$ , как этого мы и должны ожидать, имеет собственными значениями значения  $\pm B$ .

Для собственного значения  $a = +B$  существует две *независимых* собственных функции, которые мы назовем

$$\varphi_+^{(1)}(\zeta) \text{ и } \varphi_+^{(2)}(\zeta).$$

Эти собственные функции определяются их значениями для четырех возможных значений переменной  $\zeta$ , а именно:

$$\begin{array}{cccc} \varphi_+^{(1)}(1) = 1 & \varphi_+^{(1)}(2) = 0 & \varphi_+^{(1)}(3) = 0 & \varphi_+^{(1)}(4) = 0 \\ \varphi_+^{(2)}(1) = 0 & \varphi_+^{(2)}(2) = 0 & \varphi_+^{(2)}(3) = 0 & \varphi_+^{(2)}(4) = 1 \end{array} \quad (17)$$

Эти функции — нормированы и ортогональны, ибо мы имеем

$$\int |\Psi_+^{(1)}|^2 d\zeta = 1 \quad \int |\Psi_+^{(2)}|^2 d\zeta = 1 \quad \int \Psi_+^{(1)*} \Psi_+^{(2)} d\zeta = 0. \quad (18)$$

Следовательно, собственное значение  $+B$  двукратно.

Точно также собственное значение  $a = -B$  двойное, так как ему соответствуют две собственные независимые функции, нормированные и ортогональные,  $\varphi_-^{(1)}(\zeta)$  и  $\varphi_-^{(2)}(\zeta)$ , определяемые по:

$$\begin{array}{cccc} \varphi_-^{(1)}(1) = 0 & \varphi_-^{(1)}(2) = 1 & \varphi_-^{(1)}(3) = 0 & \varphi_-^{(1)}(4) = 0 \\ \varphi_-^{(2)}(1) = 1 & \varphi_-^{(2)}(2) = 0 & \varphi_-^{(2)}(3) = 1 & \varphi_-^{(2)}(4) = 0. \end{array} \quad (19)$$

Легко проверить, что две функции  $\varphi_-$  ортогональны двум функциям  $\varphi_+$ .

Пусть  $\Psi(x, y, z, t, \zeta)$  — волновая функция электрона. В силу первого общего принципа возможные значения составляющей  $z$  его собственного магнитного момента суть собственные значения оператора  $\mathfrak{M}_z$ , а именно  $\pm B$ , то-есть  $\pm 1$  магнетон Бора.

Чтобы найти вероятности, соответствующие этим двум возможностям, мы должны написать разложение:

$$\Psi(x, y, z, t, \zeta) = c_+^{(1)}(x, y, z, t) \varphi_+^{(1)}(\zeta) + c_+^{(2)}(x, y, z, t) \varphi_+^{(2)}(\zeta) + c_-^{(1)}(x, y, z, t) \varphi_-^{(1)}(\zeta) + c_-^{(2)}(x, y, z, t) \varphi_-^{(2)}(\zeta). \quad (20)$$

По второму общему принципу вероятность значения  $+V$  есть

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} [ |c_+^{(1)}|^2 + |c_+^{(2)}|^2 ] d\tau$$

и вероятность значения  $-V$  точно также есть

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} [ |c_-^{(1)}|^2 + |c_-^{(2)}|^2 ] d\tau.$$

Подставляя последовательно в формулу (20) значения, равные 1, 2, 3, 4, мы легко находим:

$$\begin{aligned} c_+^{(1)} &= \Psi_1(x, y, z, t); & c_+^{(2)} &= \Psi_4(x, y, z, t); \\ c_-^{(1)} &= \Psi_2(x, y, z, t); & c_-^{(2)} &= \Psi_3(x, y, z, t). \end{aligned} \quad (21)$$

Следовательно, вероятность значения  $+V$  есть:

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} [ |\Psi_1|^2 + |\Psi_4|^2 ] d\tau$$

и вероятность значения  $-V$  есть

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} [ |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 ] d\tau.$$

К этому заключению мы пришли уже раньше.

Простой пример, который мы рассмотрели, показывает, как можно получить собственные значения и функции операторов, которые действуют только на  $\zeta$ . Эти положения в особенности применимы к операторам, о которых мы скажем в начале следующего параграфа, к операторам, которые все имеют двойные собственные значения  $\pm 1$ .

#### 4. Шестнадцать основных операторов теории Дирака. Соответствующие величины и плотности

При помощи операторов  $\alpha_i$  и единичной матрицы (с 4 строками и 4 столбцами) можно составить следующую таблицу, со-

державшую шестнадцать эрмитовых операторов, действующих только на переменную  $\xi$ :

$$\begin{array}{cccccc}
 & & & \alpha_4 & & \\
 & & & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & 1 \\
 i\alpha_2\alpha_3\alpha_4 & i\alpha_3\alpha_1\alpha_4 & i\alpha_1\alpha_2\alpha_4 & i\alpha_1\alpha_4 & i\alpha_2\alpha_4 & i\alpha_3\alpha_4 & \\
 & i\alpha_2\alpha_3 & i\alpha_3\alpha_1 & i\alpha_1\alpha_2 & i\alpha_1\alpha_2\alpha_3 & & \\
 & & & \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 & & & 
 \end{array} \quad (22)$$

В этой таблице на  $i$  помножаются произведения  $\alpha_i$ , когда они антиэрмитовы таким образом, чтобы получить эрмитовые операторы. Вполне естественно, можно было бы, переставляя  $\alpha_i$ , получить еще другие операторы такие, как например  $i\alpha_4\alpha_1$ , но каждый из этих новых операторов был бы равен или равен с противоположным знаком одному из тех, которые фигурируют в таблице.

Помножая некоторые операторы таблицы (22) на подходящий множитель, мы находим операторы, которые соответствуют уже изученным величинам. Например, по формулам (7) и (8) главы XII, операторы второй строки, помноженные три первые на  $es$ , а последний на  $-e$ , соответствуют составляющим среднего электрического тока и средней электрической плотности.

Операторы третьей строки, помноженные на магнетон Бора  $\frac{eh}{4\pi m_0 c}$ , согласно уравнений (9) главы XIV, соответствуют координатам собственного магнитного момента и собственного электрического момента электрона. Наконец, три первые оператора четвертой строки, помноженные на  $\frac{h}{4\pi}$ , соответствуют, согласно формул (42) главы XV, трем составляющим  $S_x$ ,  $S_y$  и  $S_z$  собственного момента вращения. Согласно изложенного в конце последней главы мы точно также предугадываем, что оператор  $\alpha_4$ , помноженный на  $m_0$ , мог бы соответствовать собственной массе.

При помощи шестнадцати операторов таблицы (22) мы можем составить шестнадцать плотностей среднего значения, имеющих тензорный характер и все действительные, которые мы напомним следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \Omega_1 &= \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_4 \Psi_k & (a) \\
 \left. \begin{aligned}
 i_1 &= ec \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \Psi_k & i_2 &= ec \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_2 \Psi_k \\
 i_3 &= ec \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_3 \Psi_k & i_4 &= -ec \sum_1^4 \Psi_k^* 1 \Psi_k
 \end{aligned} \right\} (b) \\
 \mu_{32} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k \\
 \mu_{14} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_4 \Psi_k \\
 \mu_{13} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_1 \alpha_4 \Psi_k \\
 \mu_{24} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_4 \Psi_k \\
 \mu_{21} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4 \Psi_k \\
 \mu_{34} &= \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k \\
 \left. \begin{aligned}
 \sigma_1 &= \frac{h}{4\pi} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_3 \Psi_k; & \sigma_2 &= \frac{h}{4\pi} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_1 \Psi_k \\
 \sigma_3 &= \frac{h}{4\pi} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \Psi_k; & \sigma_4 &= \frac{h}{4\pi} i \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \Psi_k
 \end{aligned} \right\} (d) \\
 \Omega_2 &= \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k & (e)
 \end{aligned} \tag{23}$$

Величины  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  инвариантны по отношению к преобразованию Лоренца. Мы их уже знаем. Рассматриваемые, как плотности средних значений, они являются инвариантными плотностями. Физическое значение  $\Omega_2$ , если оно существует, еще не известно. Значение же величины  $\Omega_1$  будет рассмотрено дальше.

Четыре количества (b) образуют четырехмерный пространственно-временной вектор<sup>1)</sup>. Мы уже знаем, что они соответствуют четырем составляющим „пространственно временного век-

<sup>1)</sup> В таблице (23) составляющие с индексом 4 относятся к четвертой пространственно-временной переменной  $x_4 = ct$ . Следовательно, мы имеем  $i_4 = cp$ .

тора электрического тока", хорошо известного в теории относительности. Интегрируя составляющую  $i_4$  по всему пространству, мы получаем инвариантную величину, которая является, с точностью до множителя  $c$ , полным электрическим зарядом —  $e$  электрона.

Шесть количеств ( $c$ ) суть шесть различных составляющих антисимметричного тензора второго порядка. Мы их знаем хорошо: это плотности магнитного момента и электрического момента, рассмотренных в главе XIV, параграфа 3.

Четыре количества ( $d$ ) преобразуются, как составляющие пространственно-временного вектора. Три первые  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ , как мы это уже знаем, суть плотности среднего значения собственного момента вращения  $\vec{S}$  (спин). Временная составляющая  $\sigma_4$  дополняет пространственно-временной вектор: ее физическая интерпретация не представляется с достаточной ясностью.

### 5. Замечания о векторе $\vec{\sigma}$

Пространственно-временной вектор  $\vec{\sigma}$ , согласно предыдущему, может быть назван „вектором спина“. Длина  $|\sigma|$  такого пространственно-временного вектора дается по определению формулой

$$|\sigma|^2 = \sigma_4^2 - \sigma_1^2 - \sigma_2^2 - \sigma_3^2. \quad (24)$$

Если мы произведем вычисление, то получим в результате

$$|\sigma|^2 = -(\Omega_1^2 + \Omega_2^2) \frac{h^2}{16\pi^2}. \quad (25)$$

Следовательно, спин есть вектор „пространственного“ вида, как выражаются в теории относительности. Это существенно отличает его от вектора тока, который по формуле (14) главы XII, принадлежит к „временному“ виду.

Вернемся теперь к плоской монохроматической волне с волновыми функциями

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= -\frac{A p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_z z)} \\ \Psi_2 &= \frac{B p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c} e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_z z)} \\ \Psi_3 &= A e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_z z)} \\ \Psi_4 &= B e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_z z)} \end{aligned} \quad (26)$$

где  $W = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_z^2}$ .

Произведем явное вычисление составляющих  $\vec{\sigma}$  в этом отдельном случае. Мы находим

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \frac{h}{4\pi} (A^*B + AB^*) \left( 1 - \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right) \\ \sigma_2 &= \frac{h}{4\pi} i (A^*B - B^*A) \left( 1 - \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right) \\ \sigma_3 &= \frac{h}{4\pi} (AA^* - BB^*) \left( 1 + \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right) \\ \sigma_4 &= \frac{h}{4\pi} 2(AA^* - BB^*) \cdot \frac{p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c}.\end{aligned}\tag{27}$$

Так как составляющие четырехмерного „пространственно-временного вектора электрического тока“ для плоской волны суть:

$$\begin{aligned}i_1 = j_x = 0 \quad i_2 = j_y = 0 \quad i_3 = j_z = -e\rho \frac{c^2 p_z}{W} \\ i_4 = c\delta = -e\rho c,\end{aligned}$$

как это вытекает из формул главы XII, параграф 4, мы легко находим:

$$(\vec{i} \cdot \vec{\sigma}) = i_4 \sigma_4 - i_1 \sigma_1 - i_2 \sigma_2 - i_3 \sigma_3 = 0.\tag{28}$$

Таким образом, скалярное произведение пространственно-временных векторов  $\vec{i}$  и  $\vec{\sigma}$  здесь равно нулю. Следовательно, для плоской монохроматической волны два четырехмерных пространственно-временных вектора „тока“ и „спина“ — ортогональны в пространстве-времени (это, конечно, не значит, что соответствующие пространственные векторы перпендикулярны).

Таким образом мы можем написать (28) в виде:

$$\sigma_4 = \sigma_3 \frac{p_z c}{W} = \sigma_1 v_1 + \sigma_2 v_2 + \sigma_3 v_3.\tag{28 бис}$$

Следовательно, в данном случае составляющую  $\sigma_4$  можно считать скалярным произведением *в пространстве* векторов „плотность собственного момента вращения“ и „скорость“.

Для скорости, близкой к  $c$ , отношение  $\frac{p_z}{\frac{W}{c} + m_0 c}$  близко к 1,

и по (27) составляющие  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  почти равны нулю. Сравнивая этот результат с изложенным в конце последней главы, мы ви-

дим, что в механике Дирака частица со скоростью близкой к  $c$ , связываемая с монохроматической плоской волной, имеет свои три пространственных вектора  $\vec{I}$ ,  $\vec{J}$  и  $\vec{\sigma}$ , взаимно перпендикулярными, причем последний направлен по нормали к волне<sup>1)</sup>.

Мы закончим эти замечания о спине, приведя общее соотношение между составляющими этого вектора и инвариантом  $\Omega_2$ .

Это соотношение, данное Уленбеком<sup>1</sup> и Ляпортом, при наших обозначениях будет иметь вид:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \sigma_4}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_1}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_2}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_3}{\partial z} = \sum_1^4 \frac{\partial \sigma}{\partial x} = -m_0 c \Omega_2. \quad (29)$$

В случае плоской волны оно тождественно удовлетворяется, так как все его члены, взятые отдельно, равны нулю. Легко доказать соотношение (28), исходя из уравнения Дирака и его сопряженного. Его истинный физический смысл остается неизвестным.

### 6. Замечания об инварианте $\Omega_1$ и операторе $-m_0 \alpha_4$

Мы уже видели, что физической величине „собственная масса“ в теории Дирака в известном смысле соответствует оператор  $-m_0 \alpha_4$ . Если мы примем это соответствие, то плотность среднего значения, которое мы из него выводим, есть

$$-m_0 \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_4 \Psi_k = -m_0 \Omega_1 \quad (30)$$

Она инвариантна. Если мы проинтегрируем эту плотность по пространству, мы получаем среднее значение

$$\bar{m}_0 = -m_0 \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_4 \Psi d\tau = -m_0 \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_1 d\tau \quad (31)$$

или, подставляя значение  $\Omega_1$ :

$$\bar{m}_0 = m_0 \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} (\Psi_3^* \Psi_3 + \Psi_4^* \Psi_4 - \Psi_1^* \Psi_1 - \Psi_2^* \Psi_2) d\tau, \quad (32)$$

<sup>1)</sup> Можно было бы удивиться, видя, что собственный момент вращения  $\vec{S}$  электрона Дирака никогда не совпадает по направлению с магнитным моментом  $\vec{M}$ , и поверить, что это противоречит соотношению:

$$\frac{\vec{M}}{\vec{S}} = -\frac{e}{m_0 c}, \quad (*)$$

которым выражается двойной магнетизм электрона. Но нужно заметить, что соотношение (\*) действительно только для систем координат, где электрон находится в состоянии покоя, ибо  $\vec{M}$  и  $\vec{S}$  не изменяются одинаково при преобразовании Лоренца. В действительности для магнитного момента *плотности* составляющих преобразуются, как составляющие 23, 31 и 12 тензора. Для момента вращения, наоборот, сами составляющие преобразуются таким именно способом.

формулу, которая подтверждает идею, что волны с индексом 3 и 4 соответствуют собственной массе  $+m_0$ , а волны с индексами 1 и 2 — собственной массе  $-m_0$ .

Среднее значение (31) не является инвариантом. Если мы хотим из него вывести инвариантное количество, мы должны проинтегрировать по четвертой пространственно-временной переменной  $x=ct$ ; так мы получаем

$$\int^t m_0 c dt = -m_0 c \int^t dt \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_1 dx dy dz. \quad (33)$$

Чтобы постараться хотя бы немного вскрыть физическое значение этих формул, возьмем еще случай плоской монохроматической волны (26) и вычислим значение, которое имеет в этом случае  $\bar{m}_0$ . По (30) мы легко находим

$$\begin{aligned} -m_0 \Omega_1 &= m_0 (AA^* + BB^*) \left[ 1 - \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2} \right] = \\ &= m_0 (AA^* + BB^*) \frac{2 m_0 c^2}{W + m_0 c^2} \end{aligned} \quad (34)$$

Чтобы получить  $\bar{m}_0$ , нужно проинтегрировать, а это, принимая во внимание нормировку  $\Psi^1$ ), дает:

$$\bar{m}_0 = m_0 \cdot \frac{2 m_0 c^2}{W + m_0 c^2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{p_z^2}{\left(\frac{W}{c} + m_0 c\right)^2}} \quad (35)$$

или еще:

$$\bar{m}_0 = m_0 \cdot \frac{m_0 c^2}{W} = m_0 \sqrt{1 - \beta^2} \quad (36)$$

при этом  $\beta c$  представляет скорость, которая согласно релятивистской динамики соответствует энергии  $W$ .

Следовательно, инвариантный интеграл (33) представляет собой ничто иное (с точностью до постоянной), как *интеграл действия*:

$$\int^t m_0 c \sqrt{1 - \beta^2} dt \quad (37)$$

материальной точки в релятивистской динамике. Таким образом мы имеем следующую теорему: „Для электрона Дирака, связанного с плоской монохроматической волной, интеграл по времени среднего значения собственной массы совпадает с интегралом действия эйнштейновой динамики“.

1) См. примечание на стр. 140.



Таблица величин и плотностей, связанных с электроном

Физические величины	Операторы	Плотности среднего значения	Релятивистская вариантность плотности
Собственная масса?	$(-m_0) \alpha_4$	$-m_0 \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_4 \Psi_k = -m_0 \rho_1$	Инвариантная
Электрический заряд	$-e \cdot 1$	$\delta = -\rho e = -e \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot 1 \Psi_k$	
Электрический ток	$e c \alpha_1$	$j_x = -\rho e u_x = e c \sum_k^4 \Psi_k^* \cdot \alpha_1 \Psi_k$	Пространственно-временной вектор
	$e c \alpha_2$	$j_y = -\rho e u_y = e c \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_2 \Psi_k$	
	$e c \alpha_3$	$j_z = -\rho e u_z = e c \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_3 \Psi_k$	
Магнитный момент	$M_x$	$I_x = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k$	Антисимметричный тензор второго ранга (первая часть)
	$M_y$	$I_y = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_1 \alpha_4 \Psi_k$	
	$M_z$	$I_z = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4 \Psi_k$	

Физические величины	Операторы	Плотности среднего значения	Релятивистская вариантность плотности
Электрический момент $\left\{ \begin{array}{l} P_x \\ P_y \\ P_z \end{array} \right.$	$\frac{eh}{4\pi m_0 c} \cdot i \alpha_1 \alpha_4$ " $\cdot i \alpha_2 \alpha_4$ " $\cdot i \alpha_3 \alpha_4$	$J_x = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_4 \Psi_k$ $J_y = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_4 \Psi_k$ $J_z = \frac{eh}{4\pi m_0 c} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k$	Антисимметричный тензор второго ранга (вторая часть)
Собственный момент вращения (спин) $\left\{ \begin{array}{l} S_x \\ S_y \\ S_z \end{array} \right.$ ? $S_4$	$\frac{h}{4\pi} i \alpha_2 \alpha_3$ " $i \alpha_3 \alpha_1$ " $i \alpha_1 \alpha_3$ " $i \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3$	$\sigma_x = \frac{h}{4\pi} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_2 \alpha_3 \Psi_k$ $\sigma_y = \frac{h}{4\pi} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_3 \alpha_1 \Psi_k$ $\sigma_z = \frac{h}{4\pi} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_3 \Psi_k$ $\sigma_4 = \frac{h}{4\pi} i \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \Psi_k$	Совершенно антисимметричный тензор третьего ранга = пространственно временной вектор
? $?$	$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$	$\Omega_2 = \sum_k^4 \Psi_k^* \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \Psi_k$	Совершенно антисимметричный тензор четвертого ранга = инвариант

Таблица 16 основных эрмитовых операторов теории Дирака

$$\alpha_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad 1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$i\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_3\alpha_1\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_1\alpha_2\alpha_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$i\alpha_1\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_2\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_3\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$i\alpha_2\alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_3\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_1\alpha_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}; \quad i\alpha_1\alpha_2\alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

ЧАСТЬ ТРЕТЬЯ  
**ПРИМЕНЕНИЯ ТЕОРИИ ДИРАКА**  
**КРИТИЧЕСКИЕ ЗАМЕЧАНИЯ И РАЗЛИЧНЫЕ ДОПОЛНЕНИЯ**

Глава XVII

**Объяснение тонкой структуры при помощи теории Дирака**

**1. Волновое уравнение для движения электрона в центральном поле<sup>1)</sup>**

Мы предполагаем показать в этой главе, что теория Дирака дает прекрасное объяснение тонкой структуры оптических спектров и спектров X-лучей, не вызывая таких трудностей, как в прежней теории тонкой структуры Зоммерфельда.

Рассмотрим электрон, движущийся в статическом центральном поле, с потенциалом  $V(r)$ . Уравнения Дирака для этого электрона будут:

$$\begin{aligned}
 a) \quad & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} + m_0 c \right] \Psi_1 - \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_4 - \frac{\partial}{\partial z} \Psi_3 = 0 \\
 b) \quad & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} + m_0 c \right] \Psi_2 - \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_3 + \frac{\partial}{\partial z} \Psi_4 = 0 \\
 c) \quad & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} - m_0 c \right] \Psi_3 - \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_2 - \frac{\partial}{\partial z} \Psi_1 = 0 \\
 d) \quad & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} - m_0 c \right] \Psi_4 - \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_1 + \frac{\partial}{\partial z} \Psi_2 = 0
 \end{aligned} \tag{1}$$

Вполне естественно стараться выразить каждую из  $\Psi_k$ , как произведение сферической функции Лапласа на функцию радиуса-вектора.

Напомним, что сферические функции Лапласа имеют следующую форму:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = C e^{\pm i m \varphi} P_l^m(\cos \theta) = C e^{\pm i m \varphi} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (1 - \cos^2 \theta)^l \tag{2}$$

Так как постоянная  $C$  произвольна, выберем ее, по Дарвину, так, чтобы иметь:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (l - m)! e^{i m \varphi} \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} \left( \frac{(1 - \cos^2 \theta)^l}{2^l \cdot l!} \right) \cdot \sin^m \theta \tag{3}$$

<sup>1)</sup> Мы придерживаемся здесь метода, употреблявшегося Ч. Г. Дарвиным (*Proc. Roy. Soc. A.* том 118, 1928, стр. 554).

при  $l=0, 1, 2 \dots$  и  $m=-l, -(l-1) \dots +l$ . К тому же заметим, что функция (3) не нормирована на поверхности шара радиуса, равного единице.

Пользуясь формулами преобразования прямоугольных координат в полярные координаты, мы докажем следующие соотношения, где  $f(r)$  означает какую-нибудь функцию радиуса-вектора.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y}\right) f Y_l^m &= \frac{1}{2l+1} \left\{ \left[ \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{l}{r} f \right] Y_{l+1}^{m+1} - \right. \\ &\quad \left. - (l-m)(l-m-1) \left( \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{l+1}{r} f \right) Y_{l-1}^{m+1} \right\} \\ \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y}\right) f Y_l^m &= \frac{1}{2l+1} \left\{ - \left[ \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{l}{r} f \right] Y_{l+1}^{m-1} + \right. \\ &\quad \left. + (l+m)(l+m-1) \left( \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{l+1}{r} f \right) Y_{l-1}^{m-1} \right\} \quad (4) \\ \frac{\partial}{\partial z} f Y_l^m &= \frac{1}{2l+1} \left\{ \left( \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{l}{r} f \right) Y_{l+1}^m + \right. \\ &\quad \left. + (l+m)(l-m) \left( \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{l+1}{r} f \right) Y_{l-1}^m \right\} \end{aligned}$$

При помощи формул (4) мы сможем выразить производные, которые фигурируют в (1), так как мы полагаем, что каждая  $\Psi_\kappa$  является произведением функции от  $r$  на функцию Лапласа. Тогда сделаем допущение, что функция  $\Psi_3$  пропорциональна функции  $Y_l^m$  при данном значении  $l$  и  $m$ .

Рассматривая теперь уравнение (с) из (1), мы видим, что члены с  $Y_l^m$ , происходящие от  $-\frac{\partial \Psi_1}{\partial z}$  и от  $-\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y}\right) \Psi_2$ , должны сократиться на член с  $\Psi_3$  и что остальные члены должны взаимно уничтожиться. В результате получается, что  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  должны зависеть от той же самой функции радиуса-вектора и быть соответственно пропорциональными либо  $Y_{l+1}^m$  и  $Y_{l+1}^{m-1}$ , либо  $Y_{l-1}^m$  и  $Y_{l-1}^{m-1}$ .

Точно также уравнение (а) из (1) показывает, что  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$  должны зависеть от той же самой функции от радиуса-вектора и что  $\Psi_4$  должна быть пропорциональна  $Y_l^{m-1}$ .

Наконец, мы приходим к рассмотрению сначала одного решения, которое мы можем написать <sup>1)</sup>:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1 &= ia_1 F_+(r) Y_{l+1}^m(\theta, \varphi); & \Psi_2 &= ia_2 F_+(r) Y_{l+1}^{m-1}(\theta, \varphi); \\ \Psi_3 &= a_3 G_+(r) Y_l^m(\theta, \varphi); & \Psi_4 &= a_4 G_+(r) Y_l^{m-1}(\theta, \varphi). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

<sup>1)</sup> Мы вводим множитель  $i$  в  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  для того, чтобы  $a_1$  и  $a_2$  были действительными. См. формулы (9).

Введем формы (I) в уравнения (a) и (b) из (1). Мы получаем:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} + m_0 c \right] a_1 F_+ Y_{l+1}^m - \frac{a_4}{2l+1} \\
 & \quad \left\{ \left( \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ \right) Y_{l+1}^m - (l-m)(l-m+1) \right. \\
 & \left. \left( \frac{dG_+}{dr} + \frac{l+1}{r} G_+ \right) Y_{l-1}^m \right\} - \frac{a_3}{2l+1} \left\{ \left( \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ \right) Y_{l+1}^m + \right. \\
 & \quad \left. + (l+m)(l-m) \left( \frac{dG_+}{dr} + \frac{l+1}{r} G_+ \right) Y_{l-1}^m \right\} = 0. \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} + m_0 c \right] a_2 F_+ Y_{l+1}^{m-1} - \frac{a_3}{2l+1} \\
 & \quad \left\{ - \left( \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ \right) Y_{l+1}^{m-1} + (l+m)(l+m-1) \right. \\
 & \left. \left( \frac{dG_+}{dr} + \frac{l+1}{r} G_+ \right) Y_{l-1}^{m-1} \right\} + \frac{a_4}{2l+1} \left\{ \left( \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ \right) Y_{l+1}^{m-1} + \right. \\
 & \quad \left. + (l+m-1)(l-m+1) \left( \frac{dG_+}{dr} + \frac{l+1}{r} G_+ \right) Y_{l-1}^{m-1} \right\} = 0.
 \end{aligned}$$

Для того, чтобы исчезли члены с  $Y_{l-1}^m$  в первом уравнении (5) и члены с  $Y_{l-1}^{m-1}$  во втором, достаточно положить:

$$\frac{a_3}{a_4} = \frac{l-m+1}{l+m}. \quad (6)$$

С другой стороны, подставим (I) в уравнения (c) и (d) из (1). Получится:

$$\begin{aligned}
 & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} - m_0 c \right] a_3 G_+ Y_l^m - \frac{ia_2}{2l+3} \\
 & \quad \left\{ \left( \frac{dF_+}{dr} - \frac{l+1}{r} F_+ \right) Y_{l+2}^m - (l-m+2)(l-m+1) \right. \\
 & \left. \left( \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ \right) Y_l^m \right\} - \frac{ia_1}{2l+3} \left\{ \left( \frac{dF_+}{dr} - \frac{l+1}{r} F_+ \right) Y_{l+2}^m + \right. \\
 & \quad \left. + (l+m+1)(l-m+1) \left( \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ \right) Y_l^m \right\} = 0. \quad (7)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi i}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} - m_0 c \right] a_+ G_+ Y_l^{m-1} - \frac{ia_1}{2l+3} \left\{ - \left( \frac{dF_+}{dr} - \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{l+1}{r} F_+ \right) Y_{l+2}^{m-1} + (l+m+1)(l+m) \left( \frac{dF_+}{dr} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{l+2}{r} F_+ \right) Y_l^{m-1} \right\} + \frac{ia_2}{2l+3} \left\{ \left( \frac{dF_+}{dr} - \frac{l+1}{r} F_+ \right) Y_{l+2}^{m-1} + \right. \\ & \quad \left. + (l+m)(l-m+2) \left( \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ \right) Y_l^{m-1} \right\} = 0. \end{aligned}$$

Чтобы исчезли члены с  $Y_{l+2}^m$  из первого уравнения (7) и члены с  $Y_{l+2}^{m-1}$  из второго, нужно положить:

$$a_2 = -a_1 \quad (8)$$

Отношение  $\frac{a_1}{a_3}$  произвольно, ибо мы можем включить его в  $\frac{F_+}{G_+}$ . Следовательно, мы можем удовлетворить условиям (6) и (8), полагая:

$$a_1 = 1 \quad a_2 = -1 \quad a_3 = l - m + 1 \quad a_4 = l + m \quad (9)$$

так, что  $a_3 + a_4 = 2l + 1$ .

В этих условиях оба уравнения (5) приводятся к одному уравнению:

$$\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W + eV}{c} + m_0 c \right] F_+ + \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ = 0. \quad (10)$$

Уравнения (7) точно также приводятся к одному уравнению:

$$- \frac{2\pi}{h} \left( \frac{W + eV}{c} - m_0 c \right) G_+ + \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ = 0. \quad (11)$$

Решение (I) характеризуется тем, что нижние индексы  $Y$  суть  $l$  и  $l+1$ . Среднее из этих двух значений есть  $l + \frac{1}{2}$ , которую мы будем называть  $j$ . Таким образом, решение (I) характеризуется квантовыми числами  $l, j = l + \frac{1}{2}$  и  $m$ .

Мы отыщем первое решение, в котором  $\Psi_3$  пропорционально  $Y_l^m$ . Но мы уже видели, что может существовать другое, в котором  $\Psi_1$  пропорциональна  $Y_{l-1}^m$  и  $\Psi_2$  пропорциональна  $Y_{l-1}^{m-1}$ .

Таким образом, мы пришли к решению (II) формы:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= ia_1' F_-(r) Y_{l-1}^m(\theta, \varphi); & \Psi_2 &= ia_2' F_-(r) Y_{l-1}^{m-1}(\theta, \varphi); \\ \Psi_3 &= a_3' G_-(r) Y_l^m(\theta, \varphi); & \Psi_4 &= a_4' G_-(r) Y_l^{m-1}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (II)$$

Подставляя формы (II) в уравнения (1) и рассуждая, как и прежде, мы приходим к условиям:

$$\frac{a_2'}{a_1'} = -\frac{l+m-1}{l-m} \quad a_3' = -a_4' \quad (12)$$

аналогичным (6) и (8). Мы удовлетворим этим условиям, положив:

$$a_1' = -(l-m) \quad a_2' = l+m-1 \quad a_3' = 1 \quad a_4' = -1. \quad (13)$$

Тогда мы находим для  $F_-$  и  $G_-$  уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} + m_0c \right] F_- + \frac{dG_-}{dr} + \frac{l+1}{r} G_- = 0 \\ -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} - m_0c \right] G_- + \frac{dF_-}{dr} - \frac{l-1}{r} F_- = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

аналогичные (10) и (11).

Волновые функции (II) представляют собой решение, соответствующее квантовым числам  $l, j=l-1/2$  и  $m$ .

Теперь мы заметим, что для  $l=0$  (член  $s$ ) решение (II) не существует, так как нет функций  $Y_{-1}^m$  с отрицательным индексом.

Мы вскоре увидим, что определение функций  $F$  и  $G$  вводит квантовое число  $n$ , полное квантовое число, вследствие чего всякое полное решение характеризуется четырьмя квантовыми числами  $n, l, j=l\pm 1/2, m$

Итак, мы подытожим полученные в этом параграфе результаты в следующей таблице:

*Решение (I)  $n, l, j=l+1/2, m$*

$$\begin{aligned} \Psi_1 = iF_+ Y_{l+1}^m; \quad \Psi_2 = -iF_+ Y_{l+1}^{m-1}; \\ \Psi_3 = (l-m+1)G_+ Y_l^m; \quad \Psi_4 = (l+m)G_+ Y_l^{m-1} \\ \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} + m_0c \right] F_+ + \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ = 0; \\ -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} - m_0c \right] G_+ + \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ = 0. \end{aligned}$$

*Решение (II)  $n, l, j=l-1/2, m$*

$$\begin{aligned} \Psi_1 = -i(l-m)F_- Y_{l-1}^m; \quad \Psi_2 = i(l+m-1)F_- Y_{l-1}^{m-1} \\ \Psi_3 = G_- Y_l^m; \quad \Psi_4 = -G_- Y_l^{m-1} \\ \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} + m_0c \right] F_- + \frac{dG_-}{dr} + \frac{l+1}{r} G_- = 0; \\ -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W+eV}{c} - m_0c \right] G_- + \frac{dF_-}{dr} - \frac{l-1}{r} F_- = 0. \end{aligned}$$



Из этой таблицы видно, что уравнения, удовлетворяющиеся  $F_-$  и  $G_-$ , выводятся из уравнений, удовлетворяющихся  $F_+$  и  $G_+$  путем замены  $l$  на  $-(l+1)$ .

## 2. Количество решений, соответствующее данному значению $n$ и $l$ ; момент вращения электрона в стационарных состояниях

Интересно задаться вопросом, сколько может быть стационарных состояний, соответствующих данному значению квантовых чисел  $n$  и  $l$ . *A priori* очевидно, что их существует столько, сколько значений допускает  $m$ , при определенных  $n$  и  $l$ .

Рассмотрим сначала решения типа (I) и подсчитаем возможные значения  $m$ , заметив, что верхний индекс функций  $Y$  должен быть по абсолютной величине не больше нижнего индекса. Нет никаких возражений против того, чтобы мы взяли  $m = 0, 1, \dots, l$ ; могло бы показаться невозможным брать  $m = l+1$ , ибо тогда  $\Psi_3$  содержала бы несуществующую функцию  $Y_l^{l+1}$ , но коэффициент  $a_3$  при значении  $m = l+1$  равен нулю, а вследствие этого мы можем брать это значение  $m$ . Значения же  $m$  большие  $l+1$ , наоборот, неприемлимы.

С другой стороны, мы можем без затруднений брать отрицательные значения  $-1, -2, \dots, -(l-1)$ . Можно ли брать значения  $-l$ ? Да, ибо тогда  $a_4$  есть нуль. Но значения  $m$  меньше, чем  $-l$  неприемлимы. Наконец, для решений типа (I) таких, что  $j = l + \frac{1}{2}$ , мы имеем  $2l+2$  возможных значений  $m$ , то-есть  $l$  отрицательных значений, значение нуль и  $l+1$  положительных значений. Следовательно, в данном случае имеется  $2l+2 = 2j+1$  *a priori* различных стационарных состояний.

Возьмем решения типа (II),  $m$  может принимать значения  $0, 1, \dots, l-1$  и может, точно также принять значение  $l$ , что приведет к появлению в  $\Psi_1$ , несуществующей функции  $Y_{l-1}^l$ , но одновременно делает равным нулю  $a'_1$ . Число  $m$  точно также может принимать отрицательные значения  $-1, -2, \dots, -(l-2)$  и, кроме того, может принять значение  $-(l-1)$ , что приводит к появлению в  $\Psi_2$  несуществующей функции  $Y_{l-1}^{-l}$ , но одновременно делает равным нулю  $a'_2$ . Значения  $m$  больше  $l$  или меньше  $-(l-1)$  — неприемлимы. Таким образом, мы имеем  $2l$  возможных значений  $m$ , то-есть  $l$  положительных значений, нулевое значение и  $(l-1)$  отрицательных значений.

Так как для решений типа (II) мы имеем  $j = l - \frac{1}{2}$ , здесь имеется  $2l = 2j+1$  *a priori* стационарных различных состояний.

Вобщем для решений (II), как и для решений (I), имеется  $(2j+1)$  различных решений. Дальше мы увидим, каким образом этот результат позволяет оправдать правило Стонера относительно распределения электронов в атоме.

Теперь мы попытаемся охарактеризовать типы (I) и (II) решений при помощи соответствующих моментов вращения. Для этого мы будем исходить из только что выведенного результата. Оператор первого интеграла, который в теории Дирака соответствует моменту вращения вокруг  $oz$ , есть не

$$M_z = \frac{\hbar}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

но

$$N_z = M_z + S_z = - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\hbar}{4\pi i} \alpha_1 \alpha_2.$$

Ибо если мы заметим, что  $\frac{\partial Y_l^m}{\partial \varphi} = im Y_l^m$ , мы легко увидим, что и для решения типа (II) точно так же, как и для решения типа (I), мы имеем формулы:

$$N_z(\Psi_\kappa) = - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_\kappa}{\partial \varphi} - \frac{\hbar}{4\pi i} \alpha_1 \alpha_2 \Psi_\kappa = - \left( m - \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{2\pi} \Psi_\kappa \quad (15)$$

при  $\kappa = 1, 2, 3, 4$ . Таким образом, мы видим, что для решения, соответствующего квантовому числу  $m$ , какой бы ни был тип:

(I) или (II), общий момент вращения  $N_z$  равен  $-\left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi}$ .

Теперь посмотрим, каковы крайние значения, которые может принимать этот момент при данном значении  $l$ . Для решения типа (I) число  $m$  может изменяться от  $-l$  до  $+(l+1)$ , а следовательно момент  $N_z$  может изменяться от  $-\left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi}$  до  $+\left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi}$ .

Таким образом, тип решения (I) соответствует моменту  $N_z$ , максимальное абсолютное значение которого есть  $\left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi}$ . Для решения типа (II) число  $m$  может изменяться, при данном  $l$ , от  $-(l-1)$  до  $+l$ . Следовательно, момент  $N_z$  может изменяться от

$$-\left(l - \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi} \text{ до } +\left(l - \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi},$$

и, таким образом, решение типа (II) соответствует максимальному абсолютному значению  $N_z$ , равному  $\left(l - \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{2\pi}$ .

Выражаясь языком прежней терминологии, нужно сказать, что  $l \frac{\hbar}{2\pi}$  является „орбитальным“ моментом вращения электрона. Тогда мы замечаем, что решения типа (I) можно охарактеризо-

вать, говоря, что они соответствуют случаям, когда спин и орбитальный момент параллельны и имеют одинаковый знак: решения типа (II), наоборот, соответствуют случаям, когда спин и орбитальный момент параллельны и имеют противоположные знаки.

### 3. Вычисление уровней энергии для атома водорода

Мы вычислим уровни энергии для водородного атома. В этом случае в уравнениях первого параграфа нужно положить  $V = \frac{e}{r}$ . Мы последовательно рассмотрим случай решений типа (I), а затем решений типа (II).

а) Решения типа (I).

Для решений типа (I) мы имеем два уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W}{c} + \frac{e^2}{cr} + m_0c \right] F_+ + \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ &= 0 \\ -\frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W}{c} + \frac{e^2}{cr} - m_0c \right] G_+ + \frac{dF_+}{dr} - \frac{l+2}{r} F_+ &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Положим:

$$A^2 = \frac{2\pi}{h} \left( \frac{W}{c} + m_0c \right) \quad B^2 = \frac{2\pi}{h} \left( m_0c - \frac{W}{c} \right) \quad (17)$$

и введем постоянную тонкой структуры  $\alpha = \frac{2\pi e^2}{ch}$ . Мы желаем отыскать уровни дискретного спектра. Эти уровни, как мы знаем, соответствуют энергии  $E = W - m_0c^2$ , которая отрицательна. Таким образом, количество  $B^2$  положительно и  $B$  действительно. С этими обозначениями уравнения (16) принимают вид:

$$\begin{aligned} \left( A^2 + \frac{\alpha}{r} \right) F_+ + \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ &= 0 \\ \left( B^2 - \frac{\alpha}{r} \right) G_+ + \frac{dF_+}{dr} + \frac{(l+2)}{r} F_+ &= 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Асимптотически при  $r$  очень большом мы имеем:

$$A^2 F_+ + \frac{dG_+}{dr} = 0; \quad B^2 G_+ + \frac{dF_+}{dr} = 0, \quad (19)$$

Откуда мы выводим:

$$\frac{d^2 G_+}{dr^2} = A^2 B^2 G_+ \quad \frac{d^2 F_+}{dr^2} = A^2 B^2 F_+ \quad (20)$$

и после интегрирования:

$$G_+ = e^{\pm AB r} \quad F_+ = e^{\pm AB r}. \quad (21)$$

Для того, чтобы  $F_+$  и  $G_+$  были равны нулю на бесконечности, мы должны взять знак  $-$ , откуда:

$$G_+ (\text{асимпт.}) = \text{const } e^{-ABr} \quad F_+ (\text{асимпт.}) = \text{const } e^{-ABr} \quad (22)$$

Эти асимптотические формы побуждают нас попытаться подставить в (18) следующие формы:

$$\begin{aligned} F_{\pm} &= e^{-ABr} [a_0 r^\gamma + a_1 r^{\gamma+1} + \dots + a_s r^{\gamma+s} + \dots]; \\ G_{\pm} &= e^{-ABr} [b_0 r^\gamma + b_1 r^{\gamma+1} + \dots + b_s r^{\gamma+s} + \dots]; \end{aligned} \quad (23)$$

в которых показатель  $\gamma$  в принципе должен предполагаться положительным, чтобы  $F_+$  и  $G_+$  остались конечными при  $r=0$ . Подставляя (23) в (18) и приравнявая нулю коэффициенты при  $r^{\gamma-1}$ , мы получаем:

$$\alpha a_0 + \gamma b_0 - l b_0 = 0; \quad -\alpha b_0 + \gamma a_0 + (l+2) a_0 = 0. \quad (24)$$

Оба уравнения (24) совместимы только в том случае, если их детерминант равен нулю, а это дает нам условие:

$$\alpha^2 + (\gamma - l)(\gamma + l + 2) = 0. \quad (25)$$

Решая (25) в отношении  $\gamma$ , мы находим:

$$\gamma = -1 + \sqrt{1 - [\alpha^2 - l(l+2)]} = -1 + \sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2}. \quad (26)$$

Мы сохраним только знак  $+$  перед радикалом, так как знак  $-$  дал бы отрицательное значение, неприемлемое для  $\gamma$ . Если мы в выражении (26) положим  $l=0$ , мы найдем для  $\gamma$  очень малое отрицательное значение. Здесь могло бы показаться, что это значение нужно отбросить, так как оно соответствует функциям  $F_+$  и  $G_+$  (а следовательно волновым функциям  $\Psi_\kappa$ ), которые становятся бесконечными при  $r=0$ . Но результаты, к которым мы придем несколько позднее, ясно показывают, что мы должны сохранить это решение при  $l=0$ .

Эту аномалию можно объяснить, заметив, что волновые функции  $\Psi_\kappa$  при  $r=0$  становятся бесконечными такого малого порядка (вследствие незначительности величины  $\alpha^2$ ), что интегралы

$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_\kappa|^2 d\tau$  продолжают сходиться. Таким образом, условие,

чтобы волновые функции всегда оставались конечными, здесь оказывается слишком строгим: существенное условие, это — чтобы их квадраты были суммируемы. Впрочем, мы видели, что та же самая трудность существовала и в релятивистской теории с одной волновой функцией (см. главу VIII, параграф 2). Таким образом, мы примем в качестве возможных значений  $\gamma$  значения (26) при  $l=0, 1, 2, \dots$

Положив это, мы вернемся к подстановке (23) в (18) и приравняем нулю коэффициент при  $r^{\gamma+s}$ ; тогда мы находим:

$$\begin{aligned} A(A a_s - B b_s) + \alpha a_{s+1} + (\gamma + s + 1 - l) b_{s+1} &= 0 \\ -B(A a_s - B b_s) - \alpha b_{s+1} + (\gamma + s + l + 3) a_{s+1} &= 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Помножим первое уравнение (27) на  $B$ , второе на  $A$  и сложим. Тогда мы получим:

$$a_{s+1}[B\alpha + A(\gamma + s + l + 3)] + b_{s+1}[B(\gamma + s - l + 1) - A\alpha] = 0, \quad (28)$$

а это позволяет положить:

$$\begin{aligned} a_{s+1} &= c_{s+1}[B(\gamma + s - l + 1) - A\alpha] \\ b_{s+1} &= -c_{s+1}[B\alpha + A(\gamma + s + l + 3)] \end{aligned} \quad (29)$$

где  $c_{s+1}$  — определенная постоянная. Подставляя соотношения (29) и те, которые получаются при замене  $s+1$  на  $s$ , в уравнение (27), мы находим для  $c_s$  рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} A c_s [-\alpha(A^2 - B^2) + 2AB(\gamma + s + 1)] &= \\ = c_{s+1}[A\alpha^2 + A(\gamma + s + l + 3)(\gamma + s - l + 1)]. \end{aligned} \quad (30)$$

Для того, чтобы функции  $F_+$  и  $G_+$  наверно были равны нулю на бесконечности, достаточно по (23), чтобы ряды  $a_0 r + \dots$  и  $b_0 r + \dots$  были ограничены. Для этого нужно, чтобы для определенного значения  $s$ , например,  $s=p$ ,  $c_{s+1}$  было равно, а  $c_s$  было не равно нулю. Таким образом, нужно, чтобы для  $s=p$  коэффициент при  $c_s$  в (30) был равен нулю, а это нам дает:

$$\gamma + p + 1 = \alpha \frac{A^2 - B^2}{2AB} \quad (31)$$

или по (26):

$$\sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2} + p = \alpha \frac{A^2 - B^2}{2AB}. \quad (32)$$

Но если мы вернемся к определениям (17), мы увидим, что:

$$\begin{aligned} \frac{A^2 - B^2}{2AB} &= \frac{W}{\sqrt{m_0^2 c^4 - W^2}} = \frac{E + m_0 c^2}{\sqrt{-2m_0 c^2 E - E^2}} = \\ &= \frac{1 + \frac{E}{m_0 c^2}}{\sqrt{-\frac{2E}{m_0 c^2} \left(1 + \frac{E}{2m_0 c^2}\right)}}, \end{aligned} \quad (33)$$

где  $E = W - m_0 c^2$  в данном случае отрицательна. Таким образом, уравнение (32) можно написать, возведя в квадрат:

$$[V(l+1)^2 - \alpha^2 + p]^2 = \alpha^2 \frac{\left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^2}{- \frac{2E}{m_0 c^2} \left(1 + \frac{E}{2m_0 c^2}\right)} \quad (34)$$

или точно также:

$$\frac{- \frac{2E}{m_0 c^2} \left(1 + \frac{E}{2m_0 c^2}\right)}{\left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^2} = \frac{\alpha^2}{[p + V(l+1)^2 - \alpha^2]^2} \quad (35)$$

Если к обоим членам (35) мы прибавим по 1, мы найдем:

$$\frac{1}{\left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^2} = 1 + \frac{\alpha^2}{(p + V(l+1)^2 - \alpha^2)^2}, \quad (36)$$

откуда конечная формула:

$$1 + \frac{E}{m_0 c^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2}{(p + V(l+1)^2 - \alpha^2)^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \quad (37)$$

Так как для решений типа (I), которыми мы в данный момент занимаемся, мы имеем  $j = l + 1$ , формулу (37) можно также написать:

$$1 + \frac{E}{m_0 c^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left[p + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right]^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \quad (38)$$

Формула (38) аналогична формуле Зоммерфельда<sup>1)</sup>, причем целое число  $j + \frac{1}{2} = l + 1$  играет роль квантового азимутального числа, а  $p$  — квантового радиального числа.

Как мы видим, уровни энергии типа (I) целиком определяются четырьмя квантовыми числами:  $l$ ,  $j (= l + \frac{1}{2})$ ,  $m$  и  $p$ . Вместо целого числа  $p$ , которое может принимать значения  $0, 1, \dots$ , можно точно также брать число  $n = p + l + 1$ , которое может принимать значение  $1, 2, \dots$ . Число  $n$  есть „главное квантовое число“, а совокупность чисел  $n, l, j, m$  определяет рассматриваемое решение.

<sup>1)</sup> См. формулу (38) в главе I.

Если мы разложим второй член (38) до второго порядка по  $\alpha^2$ , мы получаем приближенную формулу:

$$E = -\frac{R h}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (39)$$

вполне сравнимую с приближенной формулой Зоммерфельда<sup>1)</sup>, но с  $j + \frac{1}{2}$  вместо числа  $k$ .

Вспомним, что релятивистская волновая механика с одной функцией  $\Psi$  привела нас к выражению, несогласующемуся с экспериментальными данными, выражению, которое имеет ту же форму, что и (38), но с  $l$  вместо  $j$ <sup>2)</sup>.

### б) Решения типа (II).

Мы могли бы возобновить вычисления, которые необходимо произвести в данном случае, исходя из уравнений, которым удовлетворяют функции  $F_+$  и  $G_-$ . Но это бесполезно, ибо мы уже отметили, что эти уравнения получаются при замене в уравнениях (16)  $l$  на  $-(l+1)$ . Итак очевидно, что, принимая для  $F_-$  и  $G_-$  разложения формы (23), для определения  $\gamma$  мы получим уравнение, которое выводится из (26) путем упомянутой замены  $l$  на  $-(l+1)$ , то-есть

$$\gamma = -1 + \sqrt{l^2 - \alpha^2}. \quad (40)$$

Здесь, очевидно, нужно исключить случай  $l=0$ , который дал бы мнимое значение: кроме того, мы уже знаем, что для  $l=0$  нет решений типа (II). Если  $l=1$ , формула (40) дает нам очень малое отрицательное значение  $\gamma$ : здесь мы примем это значение  $l$ , заметив, что, если соответствующие волновые функции бесконечные небольшого порядка в начале координат, они, тем не менее, квадратично суммируемы. Короче говоря, мы примем для  $l$  возможные значения: 1, 2...

Продолжая вычисления, мы, очевидно, придем к формуле, которая выводится из (37) путем подстановки  $-(l+1)$  вместо  $l$ , то-есть:

$$1 + \frac{E}{m_0 c^2} = \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{\left( p + \sqrt{l^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (41)$$

Но для решений типа (II) мы имеем

$$j = l - \frac{1}{2}.$$

Итак мы возвращаемся к формуле (38).

<sup>1)</sup> См. формулу (41) главы I.

<sup>2)</sup> См. формулы (34) и (36) главы VIII.

Вместо того, чтобы охарактеризовать решение типа (II) при помощи 4 квантовых чисел  $l, j \left(= l - \frac{1}{2}\right), m, p$ , мы можем точно также охарактеризовать его 4 числами  $n, l, j, m$  при  $n = p + l$  и мы легко отыщем приближенную формулу (39).

*Резюмируя*, во всех случаях энергия уровня, характеризуемого квантовыми числами  $(n, l, j, m)$ , дается (во втором порядке по  $\alpha^2$ ) формулой (39)<sup>1</sup>.

Итак, для водорода мы находим формулу тонкой структуры Зоммерфельда, но с той существенной разницей, что азимутальное число  $k$  прежней квантовой теории здесь замещается целым числом  $j + \frac{1}{2}$ . Следовательно, дублеты Зоммерфельда нужно искать между уровнями, числа  $j$  которых разнятся на единицу. Уровни, которые различаются только квантовым азимутальным числом ( $k$  или  $l$ ), совпадают. Это находится в полном согласии с реальной тонкой структурой лучей серии Бальмера, например,  $H_{\alpha}$ . Это можно видеть из параграфа 5, главы III, а особенно из фигуры 4.

Впрочем, для водородоподобного атома (атома с атомным числом  $N$ , ионизированного  $N - 1$ -кратно) мы можем в сущности применить целиком предыдущую теорию. Тогда мы легко найдем вместо (39):

$$E = -\frac{R h N^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 N^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (42)$$

Эта формула хорошо описывает тонкую структуру спектра  $He^+$ .

#### 4. Применение полученных результатов к рентгеновским спектрам

Формулы, которые дает теория Дирака, позволяют нам объяснить структуру спектров X-лучей и в частности существование и величину правильных дублетов, не наталкиваясь на трудности, как в прежней теории Зоммерфельда. В главе III мы изложили главнейшие экспериментальные данные, которые должна объяснить теория.

Мы видели, что для вычисления уровней энергии в сложных атомах можно учесть, достаточно грубо, взаимодействие электронов, введя „число экранирования“, то-есть замещая в формулах, действительных для водородоподобных атомов, атомное число  $N$  на число  $N - z$ . Вполне естественно, число экранирования  $z$  изменяется от одного электрона к другому, будучи

<sup>1</sup>) Заметим, что здесь имеется налицо вырождение, так как число  $m$  не входит в выражение квантованной энергии.



вообще, тем большим, чем более периферичен электрон. Руководствуясь прежним атомом Бора, мы можем принять, что число экранирования для внутриатомного электрона зависит только от квантовых чисел  $n$  и  $l$ , относящихся к этому электрону. Пользуясь формулой (42) мы, таким образом, напомним, что в сложном атоме электрон с квантовыми числами  $n, l, j, m$  имеет энергию, которую дает приближенная формула:

$$E(n, l, j, m) = -\frac{R h (N - z_{21})^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (N - z_{21})^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (43)$$

Эта формула отличается от прежней формулы Зоммерфельда [см. глава III, формула (9)] заменой  $j + \frac{1}{2}$  на  $k$ . Но этой подстановки достаточно, чтобы формула (42) позволила объяснить правильные дублеты без возражений, которые возникают при применении прежней формулы Зоммерфельда. В самом деле, очевидно, что при помощи формулы (43) правильные дублеты могут быть предвидены не между уровнями с азимутальными квантовыми числами ( $k$  или  $l$ ), разнящимися на единицу, а между уровнями с тем же азимутальным квантовым числом и числом  $j$ , отличающимся на единицу. Это, как мы видели, и требуется экспериментальными данными.

Рассмотрим, например, уровни  $L_{II}$  и  $L_{III}$ , разность частот которых соответствует дублетам Зоммерфельда. Мы знаем, что:

$$\text{для } L_{II} \quad n=2 \quad l=1 \quad j=\frac{1}{2}$$

$$\text{для } L_{III} \quad n=2 \quad l=1 \quad j=\frac{3}{2}.$$

Таким образом, из (43) для разности частот соответствующих дублетов мы находим:

$$\begin{aligned} \nu_{L_{II}} - \nu_{L_{III}} &= -\alpha^2 \frac{R(N - z_{21})^4}{2^4} \left[ \frac{2}{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}} - \frac{2}{\frac{3}{2} + \frac{1}{2}} \right] = \\ &= -\frac{R \alpha^2}{16} (N - z_{21})^4 \end{aligned} \quad (44)$$

и мы видели, что, полагая  $z = 3,5$ , мы имеем полное согласие с экспериментальными данными. И здесь дублет предвидится на своем настоящем месте между двумя уровнями с теми же  $l$  и  $j$ , разнящимися на единицу.

Мы уже указывали, что в спектрах X-лучей существуют также неправильные дублеты. Эти дублеты имеют своим началом разность частот, которая существует между двумя соседними

уровнями с теми же самыми квантовыми числами  $j$ , числа  $l$  которого разнятся на единицу. Ее существование мы можем точно также объяснить при помощи формулы (43). Действительно, если бы число экранирования  $z$  не зависело от  $l$ , уровни с теми же  $j$  и различными  $l$  (такие, например, как  $L_I$  и  $L_{II}$ ) совпадали бы: это как раз наблюдается для водорода, ибо в этом случае, вполне понятно,  $z$  всегда равно нулю. Но в силу изменения  $z$  с  $l$ , мы видим, что эти уровни в сложных атомах не могут совпадать, и можно даже предвидеть закон для разности их частот. Действительно, если пренебречь членами высшего порядка по  $\alpha^2$ , мы будем иметь:

$$\sqrt{\frac{E(n, l, j)}{h}} - \sqrt{\frac{R h}{n^2} (N - z_{n, l})};$$

$$\sqrt{\frac{E(n, l+1, j)}{h}} = \sqrt{\frac{R h}{n^2} (N - z_{n, l+1})}, \quad (45)$$

откуда:

$$\sqrt{\frac{E(n, l, j)}{h}} - \sqrt{\frac{E(n, l+1, j)}{h}} = \sqrt{\frac{R h}{n^2} (z_{n, l+1} - z_{n, l})}. \quad (46)$$

Первый член (46) есть  $\delta\sqrt{v}$  для обоих уравнений, второй — независим от  $N$ . Итак мы видим, что спектральные термы двух уровней в ряде элементов таковы, что  $\delta\sqrt{v}$  не зависит от  $N$ : это и есть закон неправильных дублетов, изложенный в конце параграфа 2, главы III. Эти неправильные дублеты существуют между спектральными термами, обозначаемыми той же самой буквой с индексами, разнящимися на единицу, причем *первый нечетный*, в то время как правильные дублеты Зоммерфельда происходят от спектральных термов, характеризующихся той же самой буквой с индексами, разнящимися на единицу, причем *первый — четный*. Таким образом, разность  $\nu_{I_I} - \nu_{I_{II}}$  дает начало неправильным дублетам, а разность  $\nu_{I_{II}} - \nu_{I_{III}}$  — правильным дублетам.

Таким образом, теория Дирака целиком упорядочила теорию тонкой структуры Зоммерфельда, показавши, что первоначальный успех был неслучайный, а в последнем анализе, — что существование правильных дублетов, при помощи спина электрона, связано с теорией относительности.

## 5. Число электронов по уровням: правило Стонера

Теория Дирака не только позволила отыскать формулы тонкой структуры, улучшив их, но также дала объяснение правила Стонера относительно распределения электронов по уровням атома и доказательство правил отбора для квантовых чисел  $l$ ,  $m$  и  $j$ .

Займемся сначала первым вопросом и вспомним, что правило Стонера гласит так:

„На уровне энергии, соответствующем квантовым числам  $n, l, j$ , не может быть больше  $2j+1$  электронов“.

Мы постараемся доказать это положение.

Выше (параграф 2) мы уже видели, что для решений типа (I), как и для решений типа (II), существует  $2j+1$  уровней, соответствующих совокупности квантовых чисел  $(n, l, j)$ . Иначе говоря, так как каждый уровень вполне определяется четырьмя квантовыми числами  $n, l, j, m$ , существует  $2j+1$  возможных значений  $m$ , а следовательно,  $2j+1$  возможных уровней для

данных значений трех чисел  $n, l, j = l \pm \frac{1}{2}$ . Вспомнивши это,

чтобы идти дальше, нам нужно обратиться к новому принципу, который играет основную роль в современной физике: принципу исключения Паули.

Мы сформулируем здесь принцип исключения Паули так: „Не может быть больше одного внутриатомного электрона, стационарное состояние которого характеризуется теми же самыми четырьмя целыми числами  $n, l, j$  и  $m$ “.

Как мы уже видели, в атоме в отсутствии внешнего поля, энергия стационарного состояния не зависит от числа  $m$ ; таким образом, каждый уровень энергии вполне характеризуется тремя квантовыми числами  $n, l, j$ , как это доказал опыт еще раньше теории (см. первую часть). Таким образом, если принять принцип Паули, то число электронов, принадлежащих тому же самому уровню  $(n, l, j)$ , равно числу стационарных решений, характеризующихся четырьмя квантовыми числами  $n, l, j, m$ , из которых три первые имеют значения, которые характеризуют рассматриваемый уровень. Мы знаем, что это число решений есть  $2j+1$ . Таким образом, мы доказали правило Стонера, экспериментальная точность которого не вызывала сомнений.

## 6. Правила отбора в свете теории Дирака

В параграфе 4, главы VIII мы уже объяснили, как принцип соответствия в волновой механике приводит к предвидению правил отбора. В теории Дирака это предвидение совершается тем же самым способом, но принимая во внимание, что выражение  $\Psi\Psi^*$  волновой механики с одной волновой функцией здесь замещается на

$$\sum_k^4 \Psi_k^* \Psi_k.$$

Таким образом, мы должны рассматривать как матричные элементы  $X$ , которые служат для выражения вероятности пере-

ходов из одного состояния в другое, сопровождающихся излучением, следующие величины:

$$X_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int x (\Psi_{1,n}^* \Psi_{1,m} + \Psi_{2,n}^* \Psi_{2,m} + \Psi_{3,n}^* \Psi_{3,m} + \Psi_{4,n}^* \Psi_{4,m}) d\tau, \quad (47)$$

где индексы  $n$  и  $m$  характеризуют два стационарных состояния и каждый в действительности представляет совокупность четырех индексов  $n, l, j, m$ . Если элементы  $X_{nm}$   $Y_{nm}$   $Z_{nm}$  равны нулю, то нет излучения, соответствующего переходу  $n \rightarrow m$ . Отсюда выводятся правила отбора.

Как пример, рассмотрим переход от стационарного состояния типа (I) с квантовыми числами  $n, l, j = l + \frac{1}{2}$  в стационарное состояние типа (II) с квантовыми числами  $n, l - 1, j = l - \frac{3}{2}, m$ ; переход, для которого мы имеем  $|\delta l| = 1, \delta m = 0$  и  $|\delta j| = 2$ . Первое из этих состояний имеет волновой функцией:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= i F_+(r) Y_{l+1}^m; & \Psi_2 &= -i F_+(r) Y_{l-1}^{m-1}; \\ \Psi_3 &= (l - m + 1) G_+(r) Y_l^m; & \Psi_4 &= (l + m) G_+(r) Y_l^{m-1}, \end{aligned}$$

а второе:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= -i(l - m - 1) F_-(r) Y_{l-2}^m; \\ \Psi_2 &= i(l + m - 2) F_-(r) Y_{l-2}^{m-1}; \\ \Psi_3 &= G_-(r) Y_{l-1}^m; & \Psi_4 &= -G_-(r) Y_{l-1}^{m-1}. \end{aligned}$$

Тогда мы напишем выражение матричного элемента  $Z$ , соответствующее этому переходу, полагая для простоты:

$$A = - \int_0^{+\infty} F_+(r) F_-(r) r^2 dr; \quad B = \int_0^{+\infty} G_+(r) G_-(r) r^2 dr. \quad (48)$$

Получается:

$$\begin{aligned} Z_{nm} &= A(l - m - 1) \iint \cos \theta Y_{l-2}^{m*} Y_{l+1}^m d\Omega + \\ &+ A(l + m - 2) \iint \cos \theta Y_{l-2}^{m-1*} Y_{l+1}^{m-1} d\Omega + \\ &+ B(l - m + 1) \iint \cos \theta Y_{l-1}^{m*} Y_l^m d\Omega - \\ &- B(l + m) \iint \cos \theta Y_{l-1}^{m-1*} Y_l^{m-1} d\Omega \end{aligned} \quad (49)$$

при  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ , причем двойные интегралы распространяются по поверхности шара с радиусом равным единице. Исходя из определения функций  $Y$ , можно доказать следующие формулы:

$$\begin{aligned} \iint \cos \theta Y_{l-2}^{m*} Y_{l+1}^m d\Omega &= 0; \\ \iint \cos \theta Y_{l-1}^{m*} Y_l^m d\Omega &= \frac{4\pi}{(2l+1)(2l-1)} (l+m)!(l-m)! \\ \iint \cos \theta Y_{l-2}^{m-1*} Y_{l+1}^{m-1} d\Omega &= 0; \\ \iint \cos \theta Y_{l-1}^{m-1*} Y_l^{m-1} d\Omega &= \\ &= \frac{4\pi}{(2l+1)(2l-1)} (l+m-1)!(l-m+1)! \end{aligned}$$

Подставляя в (49), мы находим:

$$\begin{aligned} Z_{nm} = B \frac{4\pi}{(2l+1)(2l-1)} [(l-m+1)(l+m)!(l-m)! - \\ - (l+m)(l-m+1)!(l+m-1)!] = 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Точно таким же образом мы найдем  $X_{nm} = Y_{nm} = 0$ . Таким образом, рассматриваемый переход из одного состояния в другое невозможен.

Мы можем произвести вычисление того же рода, беря все комбинации решения типа (I) с решением того же типа или типа (II), затем все комбинации решения типа (II) с решением того же типа или типа (I). Результат этих вычислений следующий:

„Излучению соответствуют только такие переходы, для которых:

$$\delta l = \pm 1 \quad \delta m = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases} \quad \delta j = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases} \text{ „}$$

Эти правила отбора — те же самые, какие были найдены эмпирическим путем. Правила, относящиеся к квантовым числам  $l$  и  $m$ , были предусмотрены волновой механикой с одной волновой функцией, а правило, относящееся к квантовому числу  $j$ , могло быть предусмотрено только теорией, которая вводит это квантовое число, в данном случае теорией Дирака.

## Глава XVIII

### Вывод формулы Ланде

#### 1. Общий обзор теории возмущений

В этой главе мы предполагаем показать, что теория Дирака позволяет отыскать формулу Ланде для аномального эффекта Зеемана щелочных металлов в слабом магнитном поле. Но так как для этого мы вынуждены пользоваться теорией возмущений, мы сначала скажем несколько слов об этом методе вычислений.

Предположим, что мы определили стационарные состояния системы, например, атома водорода. Таким образом, мы знаем собственные значения  $W_n$  энергии и соответствующие собственные функции  $\Psi_{k, n}$ , причем  $k$  всегда обозначает индекс Дирака, переменную „спина“. Таким образом, символическое уравнение

$$\left[ \frac{W_n + eV}{c} + \sum_j^3 \alpha_j P_j + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi_n = 0 \quad (1)$$

удовлетворяется в том случае, если система не возмущена.

Но предположим теперь, что квантованная система подвергается легкому постоянному возмущающему действию и что оно может быть описано путем добавления члена  $\Lambda\Psi$  к уравнению (1). ( $\Lambda$  есть оператор, который может содержать  $\alpha_j$ , а следовательно, действовать на индекс  $k$ ). Вследствие присутствия небольшого возмущающего члена собственные значения и функции слабо изменятся и станут  $W_n + \varepsilon_n$  и  $\Psi_{k, n} + \eta_{k, n}$ .

Предположим, что  $\varepsilon_n$  и  $\eta_{k, n}$  очень малы, как и возмущающий член  $\Lambda\Psi$ , и мы пренебрежем такими членами, как  $\varepsilon_n$ ,  $\eta_{k, n}$  и  $\Lambda\eta_{k, n}$ .

В возмущенном состоянии символическое уравнение представляется в виде:

$$\left[ \frac{W_n + \varepsilon_n + eV}{c} + \sum_j^3 \alpha_j P_j + \alpha_4 m_0 c + \Lambda \right] (\Psi_n + \eta_n) = 0. \quad (2)$$

Вычтем (1) из (2); мы находим с принятыми приближениями

$$\left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_n + \left[ \frac{W_n + eV}{c} + \sum_j^3 \alpha_j P_j + \alpha_4 m_0 c \right] \eta_n = 0. \quad (3)$$

Рассмотрим теперь четыре функции  $\eta_{k, n}$ . Из формулы (5) главы XVI вытекает, что мы можем разложить эти функции по полной системе функций  $\Psi_m$  по формулам:

$$\eta_{k, n} = \sum_m c_{n, m} \Psi_{k, m} \quad (k = 1, 2, 3, 4) \quad (4)$$

или символически

$$\eta_n = \sum_m c_{n,m} \Psi_m. \quad (5)$$

Итак, принимая во внимание уравнение, полученное при замене  $n$  на  $m$  в (1), мы имеем

$$\begin{aligned} & \left( \frac{W_n + eV}{c} + \sum_1^3 \alpha_j P_j + \alpha_4 m_0 c \right) \eta_n = \\ & = \sum_m c_{n,m} \left[ \frac{W_n + eV}{c} + \sum_1^3 \alpha_j P_j + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi_m = \\ & = \sum_m c_{n,m} \frac{W_n - W_m}{c} \Psi_m \end{aligned} \quad (6)$$

а следовательно, по (3):

$$\sum_m c_{n,m} \frac{W_n - W_m}{c} \Psi_m = \left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_n \quad (7)$$

или явно

$$\sum_m c_{n,m} \frac{W_n - W_m}{c} \Psi_{\kappa,m} = \left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_{\kappa,n} \quad (8)$$

Помножим (8) на  $\Psi_{\kappa,m}^*$ , просуммируем по индексу  $k$  и проинтегрируем по пространству. Мы получаем:

$$\begin{aligned} & \sum_m c_{n,m} \frac{W_n - W_m}{c} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\kappa} \Psi_{\kappa,l}^* \Psi_{\kappa,m} d\tau = \\ & = \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\kappa} \Psi_{\kappa,l}^* \left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_{\kappa,n} d\tau, \end{aligned} \quad (9)$$

откуда, принимая во внимание ортогональность и нормировку собственных функций, мы выводим:

$$c_{n,l} = \frac{c}{W_n - W_l} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\kappa} \Psi_{\kappa,l}^* \left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_{\kappa,n} d\tau. \quad (10)$$

Эта формула дает нам  $c_{nl}$  для всех значений  $l$ .

Но формула (10) дала бы нам для  $l=n$  бесконечный коэффициент  $c_{nn}$ , если бы интеграл, который фигурирует в (10), для  $l=n$  отличался от нуля. Так как это неприемлемо, мы видим, что должно быть:

$$\int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\kappa} \Psi_{\kappa,n}^* \left( \frac{\varepsilon_n}{c} + \Lambda \right) \Psi_{\kappa,n} d\tau = 0. \quad (11)$$

Это условие (11), которое выражает хорошо известную теорему Фредгольма в теории интегральных уравнений, позволяет получить изменение  $\varepsilon_n$  энергии  $n$ -ого стационарного состояния, обусловленное наличием возмущения. Действительно, из (11) мы выводим:

$$\frac{\varepsilon_n}{c} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int \Sigma_k \Psi_{k,n}^* \Lambda \Psi_{k,n} d\tau, \quad (12)$$

так как  $\Psi_{k,n}$  — нормированы.

Нужно заметить, что формула (10) приемлема только в том случае, если она приводит к малым значениям  $c_{nl}$ ; без этого предположение о незначительной величине  $\eta_n$ , на которое мы опираемся, будет недействительно. Рассматривая этот момент, мы видим, что формула (12) точна только в том случае, если мы можем, как это мы неявно предполагали, считать возмущение каждого собственного значения, как независимое от тех, которые претерпевают прочие собственные значения. Для этого внешнее возмущение должно быть достаточно слабым, чтобы смещение собственных значений, зависящее от возмущения, было малым, по сравнению с разностью этих собственных значений: это именно то, что имеет место в эффекте Зеемана, когда магнитное поле слабо. Если это условие не выполнено (например, эффект Зеемана в сильном магнитном поле), вычисления по методу теории возмущений нужно произвести несколькими путями; об этом мы распространяться здесь не будем.

## 2. Применение формулы (12) в случае эффекта Зеемана

В главе IV мы видели, как формула Ланде позволяет представить изменение уровня энергии в атоме с дублетным спектром (щелочных металлов) под влиянием слабого магнитного поля. Если  $W_0(n, l, j)$  есть энергия уровня в отсутствии магнитного поля и  $W_H(n, l, j)$  эта энергия в присутствии поля  $H$ , мы имеем:

$$W_H(n, l, j) = W_0(n, l, j) + m'g \frac{e h H}{4 \pi m_0 c}, \quad (13)$$

где

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} = \frac{2j + 1}{2l + 1}. \quad (14)$$

Число  $m'$  — полуцелое число (т. е. на целое больше  $\frac{1}{2}$ ) положительное или отрицательное, могущее принимать все полу-



целые значения от  $-j$  до  $+j$ . Мы изменили обозначения главы IV, написав  $m'$  вместо  $m$ , чтобы различать полуцелое число  $m'$  формулы (13) от четвертого квантового числа  $m$ , характеризующего стационарное состояние атома, числа целого. Мы увидим, что числа  $m'$  и  $m$  связаны соотношением  $m' = -\left(m - \frac{1}{2}\right)$ .

Уточним этот момент: в формуле (13) мы определяем уровень энергии его тремя квантовыми числами  $n, l, j$ , и этого достаточно, поскольку значение энергии не зависит от четвертого квантового числа  $m$ ; но смещение уровня при эффекте Зеемана зависит от  $m'$ , и явно мы можем написать (13) в форме:

$$W_H(n, l, j, m) = W_0(n, l, j) - \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{2j+1}{2l+1} \frac{e h H}{4 \pi m_0 c}. \quad (15)$$

Это та формула, которую позволит нам отыскать теория Дирака.

Мы рассмотрим атом, в котором можно рассматривать только один электрон: это точно для водородного атома и для атома с атомным номером  $N$ , ионизированным  $(N-1)$ -кратно; это приближенно для щелочного атома, где валентный электрон только один и где можно грубо учесть присутствие других периферических электронов при помощи простого эффекта экранирования.

Предположим, что этот атом погружен в однородное магнитное поле  $H$ , направленное по оси  $z$ . Тогда мы можем взять в качестве векторного потенциала:

$$A_x = -\frac{1}{2} y H; \quad A_y = \frac{1}{2} x H; \quad A_z = 0. \quad (16)$$

Следовательно, возмущающий член уравнения (2) есть:

$$\Delta \Psi = \frac{e}{c} (\alpha_1 A_x + \alpha_2 A_y + \alpha_3 A_z) \Psi = \frac{e H}{2c} (x \alpha_2 - y \alpha_1) \Psi. \quad (17)$$

Подставляя хорошо известные нам значения  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , мы находим:

$$\begin{aligned} \Delta \Psi_1 &= i(x + iy) \frac{eH}{2c} \Psi_4; & \Delta \Psi_2 &= -i(x - iy) \frac{eH}{2c} \Psi_3 \\ \Delta \Psi_3 &= i(x + iy) \frac{eH}{2c} \Psi_2; & \Delta \Psi_4 &= -i(x - iy) \frac{eH}{2c} \Psi_1. \end{aligned} \quad (18)$$

<sup>1)</sup> Можно сказать, что присутствие магнитного поля уничтожает вырождение, которое существовало в его отсутствии.

Тогда применение формулы (12) дает нам для смещения уровня при эффекте Зеемана в слабом магнитном поле:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{c} &= \frac{W_H(n, l, j, m) - W_0(n, l, j)}{c} = \\ &= \frac{eH}{2c} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [-\Psi_1^* i(x+iy) \Psi_3 + \Psi_2^* i(x-iy) \Psi_3 - \\ &\quad - \Psi_3^* i(x+iy) \Psi_2 + \Psi_4^* i(x-iy) \Psi_1] d\tau. \end{aligned} \quad (19)$$

Вся задача теперь заключается в вычислении интеграла, который фигурирует в (19).

### 3. Развитие вычисления

Чтобы произвести вычисление, мы должны различать два случая, так как стационарное состояние энергии  $W_0(n, l, j)$  бывает типа (I) либо типа (II).

а) *Решение типа (I):*

В этом случае мы имеем:

$$\Psi_1 = i F_+(r) Y_{l+1}^m; \quad \Psi_2 = -i F_+(r) Y_{l+1}^{m-1},$$

$$\Psi_3 = (l-m+1) G_+(r) Y_l^m; \quad \Psi_4 = (l+m) G_+(r) Y_l^{m-1}, \quad (20)$$

где  $F_+$  и  $G_+$  суть две действительные функции от  $r$ , удовлетворяющие системе уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W_0 + eV}{c} + m_0 c \right] F_+ + \frac{dG_+}{dr} - \frac{l}{r} G_+ &= 0 \\ \frac{2\pi}{h} \left[ \frac{W_0 + eV}{c} - m_0 c \right] G_+ + \frac{dF_+}{dr} + \frac{l+2}{r} F_+ &= 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Так как в атоме ньютоново приближение всегда приближенно действительно, функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  очень малы по сравнению с  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ ; следовательно, отношение  $\frac{F_{\pm}}{G_{\pm}}$  очень мало. Более полное вычисление доказывает, что это отношение порядка постоянной тонкой структуры  $\alpha$ . Мы будем опираться на это положение, чтобы пренебречь квадратом  $\left(\frac{F_+}{G_+}\right)^2$ , а это даст значительные упрощения.

Помножая первое уравнение (21) на  $G_+$ , а второе на  $F_+$  и складывая их, мы получаем:

$$\frac{4\pi m_0 c}{h} F_+ G_+ + \frac{1}{2} \frac{d}{dr} \left[ F_+^2 + G_+^2 \right] + \frac{l+2}{r} F_+^2 - \frac{l}{r} G_+^2 = 0. \quad (22)$$

Пренебрегая членами с  $F_+$ , множим на  $r^3 dr$  и интегрируем от 0 до  $+\infty$ ; получается:

$$\int_0^{+\infty} F_+ G_+ r^3 dr = - \frac{h}{4\pi m_0 c} \int_0^{+\infty} \left[ \frac{r^3}{2} \frac{dG_+^2}{dr} - l G_+^2 r^2 \right] dr. \quad (23)$$

Интегрируя по частям, мы получаем, поскольку  $G_+^2$  равно нулю на бесконечности:

$$\int_0^{+\infty} F_+ G_+ r^3 dr = \frac{h}{4\pi m_0 c} \left( l + \frac{3}{2} \right) \int_0^{+\infty} G_+^2 r^2 dr. \quad (24)$$

Имея эти формулы, мы можем приступить к вычислению интеграла, который фигурирует во втором члене (19). Беря полярные координаты, мы имеем:

$$\begin{aligned} x + iy &= r \sin \theta e^{i\varphi}; & x - iy &= r \sin \theta e^{-i\varphi}; \\ d\tau &= r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int \left| -\Psi_1^* i(x+iy) \Psi_4 + \Psi_2^* i(x-iy) \Psi_3 - \right. \\ & \left. - \Psi_3^* i(x+iy) \Psi_2 + \Psi_4^* i(x-iy) \Psi_1 \right| d\tau = \\ & = - \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[ Y_{l+1}^{m*} (l+m) Y^{m-1} e^{i\varphi} + Y_{l+1}^{m-1*} (l-m+1) Y_l^m e^{-i\varphi} + \right. \\ & \left. + (l-m+1) Y_l^{m*} Y_{+1}^{m-1} e^{i\varphi} + (l+m) Y_l^{m-1*} Y_{l+1}^m e^{-i\varphi} \right] \\ & \quad \sin^2 \theta d\theta d\varphi \int_0^{+\infty} F_+ G_+ r^3 dr. \end{aligned} \quad (26)$$

Изучение функций  $Y$  дает интегралы:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l+1}^{m*} Y_l^{m-1} e^{i\varphi} \sin^2 \theta d\theta d\varphi = \\ & = \frac{4\pi}{(2l+1)(2l+3)} (l+m+1)! (l-m+1)! \\ & \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l+1}^{m-1*} Y_l^m e^{-i\varphi} \sin^2 \theta d\theta d\varphi = \\ & = - \frac{4\pi}{(2l+1)(2l+3)} (l+m)! (l-m+2)! \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m Y_{l+m}^{*m-1} e^{i\varphi} \sin \theta d\theta d\varphi = \\ & = -\frac{4\pi}{(2l+1)(2l+3)} (l+m)! (l-m+2)! \\ & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^{m-1} Y_{l+1}^{*m} e^{-i\varphi} \sin \theta d\theta d\varphi = \\ & = \frac{4\pi}{(2l+1)(2l+3)} (l+m+1)! (l-m+1)! \end{aligned}$$

Итак, для интеграла (26) мы находим значение:

$$-\frac{4\pi}{(2l+1)(2l+3)} (l+m)! (l-m+1)! 2.$$

$$\left[ (l+m)(l+m+1) - (l-m+1)(l-m+2) \right] \int_0^{+\infty} F_+ G_+ r^3 dr = \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & = -\frac{4\pi}{2l+1} (l+m)! (l-m+1)! \left[ (l+m)(l+m+1) - \right. \\ & \left. - (l-m+1)(l-m+2) \right] \frac{h}{4\pi m_0 c} \int_0^{+\infty} G_+^2 r^2 dr, \end{aligned}$$

причем последняя форма получается при введении выражения (24).

Так как легко проверить следующее тождество:

$$\begin{aligned} (l+m)(l+m+1) - (l-m+1)(l-m+2) & = \\ & = (2l+2)(2m-1), \end{aligned} \quad (29)$$

то мы можем написать выражение (28) в форме:

$$\begin{aligned} & -4\pi \cdot \frac{2l+2}{2l+1} (2m-1) (l+m)! (l-m+1)! \\ & \frac{h}{4\pi m_0 c} \int_0^{+\infty} G_+^2 r^2 dr. \end{aligned} \quad (30)$$

Чтобы идти дальше, мы должны применить условие нормировки, которое здесь дает, пренебрегая членами с  $F_+^2$  по сравнению с членами с  $G_+^2$ :

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[ (l-m+1)^2 Y_l^{*m} Y_l^m + (l+m)^2 Y_l^{*m-1} Y_l^{m-1} \right] \\ & \sin \theta d\theta d\varphi \int_0^{+\infty} G_+^2 r^2 dr = 1. \end{aligned} \quad (31)$$

Мы имеем:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left| Y_l^m \right|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \frac{4\pi}{2l+1} (l+m)! (l-m)! \quad (32)$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left| Y_l^{m-1} \right|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \frac{4\pi}{2l+1} (l+m-1)! (l-m+1)! \quad (32)$$

таким образом, что условие (31) дает нам:

$$\int_0^{+\infty} G_{+}^2 r^2 dr = \frac{1}{4\pi (l+m)! (l-m+1)!} \quad (33)$$

Вводя это значение в выражение (30), в конце концов, мы видим, что интеграл для вычисления формулы (19) просто имеет значение:

$$-\frac{2l+2}{2l+1} \left( 2m-1 \right) \frac{h}{4\pi m_0 c} \quad (34)$$

Таким образом, формула (19) дает нам для смещения уровня при эффекте Зеемана формулу:

$$W_H(n, l, j, m) = W_0(n, l, j) - \frac{eH}{2} \frac{2l+2}{2l+1} \left( 2m-1 \right) \frac{h}{4\pi m_0 c} \quad (35)$$

Теперь положим:

$$m' = -\left( m - \frac{1}{2} \right) \quad g = \frac{l+1}{l+\frac{1}{2}} = \frac{j+\frac{1}{2}}{l+\frac{1}{2}} \quad (36)$$

вспоминая, что здесь  $j = l + \frac{1}{2}$ . Мы можем написать:

$$W_H(n, l, j, m) = W_0(n, l, j) + m'g \frac{e h H}{4\pi m_0 c} \quad (37)$$

Если теперь мы предположим, что даны только три квантовых числа  $n, l, j$ , мы будем иметь:

$$W_H(n, l, j) = W_0(n, l, j) + m'g \frac{e h H}{4\pi m_0 c} \quad (38)$$

причем  $m'$  здесь полуцелое число, которое может изменяться от  $-\left( m_{\min} - \frac{1}{2} \right)$  до  $-\left( m_{\max} - \frac{1}{2} \right)$ . Далее, обсуждая число уровней, соответствующее трем квантовым числам  $(n, l, j)$ , мы видели, что

для решения типа (I) можно изменять  $m$  от  $-l$  до  $l+1$ . Таким образом, число  $m'$  при данных  $(n, l, j)$  может изменяться от  $-$

$$-\left(-l-\frac{1}{2}\right) = l+\frac{1}{2} = j \text{ до } -\left(l+1-\frac{1}{2}\right) = -\left(l+\frac{1}{2}\right) = -j.$$

Короче говоря, для уровней, соответствующих решениям типа (I), мы имеем формулу (38), где  $m'$  есть полуцелое число, могущее изменяться от  $-j$  до  $+j$ . Это и есть формула Ланде.

### б) Решение типа (II):

Чтобы произвести вычисление в случае решения типа (II), мы исходим из волновых функций:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= -i(l-m)F_- Y_{l-1}^m; \quad \Psi_2 = i(l+m-1)F_- Y_{l-1}^{m-1}; \\ \Psi_3 &= G_- Y_l^m; \quad \Psi_4 = -G_- Y_l^{m-1}, \end{aligned} \quad (39)$$

причем  $F_-$  и  $G_-$  действительные функции, которые удовлетворяют уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left| \frac{W+eV}{c} + m_0 c \right| F_- + \frac{dG_-}{dr} + \frac{l+1}{r} G_- &= 0, \\ -\frac{2\pi}{h} \left| \frac{W+eV}{c} - m_0 c \right| G_- + \frac{dF_-}{dr} - \frac{l-1}{2} F_- &= 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Путем вычислений, аналогичных приведенным выше, мы приходим к формуле:

$$\begin{aligned} W_{II}(n, l, j, m) &= W_0(n, l, j) - \\ &= \frac{2l}{2l+1} (2m-1) \frac{eH}{2} \cdot \frac{h}{4\pi m_0 c}. \end{aligned} \quad (41)$$

Так как для решений (II) мы имеем  $j = l - \frac{1}{2}$ , здесь мы положим:

$$m' = -\left(m - \frac{1}{2}\right); \quad g = \frac{l}{l + \frac{1}{2}} = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} \quad (42)$$

и мы сможем написать (41) в виде:

$$W_{II}(n, l, j, m) = W_0(n, l, j) + m'g \frac{eHh}{4\pi m_0 c}. \quad (43)$$

Предположим теперь, что нам даны только три квантовых числа  $n, l, j$ ; тогда мы напишем

$$W_{II}(n, l, j) = W_0(n, l, j) + m'g \frac{e h H}{4 \pi m_0 c}, \quad (44)$$

где  $m'$  полуцелое число, которое изменяется от  $-\left(m_{\min} - \frac{1}{2}\right)$  до  $-\left(m_{\max} - \frac{1}{2}\right)$ . Следовательно, здесь (как это мы видели)  $m$  может изменяться от  $-(l-1)$  до  $+l$ . Таким образом, число  $m'$  может изменяться от  $-\left|-(l-1) - \frac{1}{2}\right| = l - \frac{1}{2}$  до  $-\left(l - \frac{1}{2}\right)$ , то есть от  $+j$  до  $-j$ .

Короче говоря, для уровней, соответствующих типу (II), мы имеем формулу (44), где  $m'$  полуцелое число, могущее изменяться от  $-j$  до  $+j$ .

#### 4. Резюме. Замечания

Таким образом, мы доказали, что для всех уровней как типа (II), так и типа (I) смещение уровня  $(n, l, j)$  под влиянием достаточно слабого однородного магнитного поля дается уравнением:

$$W_{II}(n, l, j) - W_0(n, l, j) = m'g \frac{e h H}{4 \pi m_0 c} \quad (45)$$

при

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}}, \quad (46)$$

причем  $m'$  полуцелое число, могущее принимать все полуцелые значения между  $-j$  и  $+j$ . Это и есть аномальный эффект Зеемана, как он в точности представляется формулой Ланде. В виду того, что число  $m'$  имеет  $2j + 1$  возможных значений, каждый уровень  $(n, l, j)$  разлагается при эффекте Зеемана на  $(2j + 1)$  отдельных уровней, что можно выразить так: внешнее магнитное поле заставляет исчезать вырождение порядка  $2j + 1$ , которое существовало в его отсутствии.

Рассуждения, которые мы применяли, в точности действительны для водородоподобных атомов, но, как мы уже указывали, они могут быть применимы, по крайней мере, приближенно и к щелочным атомам.

Мы уже говорили, что формула Ланде действительна для слабых магнитных полей. Вследствие этого приходится брать достаточно слабые магнитные поля, чтобы смещение уровней энергии при эффекте Зеемана было малым по сравнению с нормальным расстоянием этих уровней. Если это условие не удовлет-

воряется, формула (12) больше недействительна, и приходится производить наново все вычисление. Можно было доказать <sup>1)</sup>, что в таком случае мы приходим к формуле, тождественной с формулой Фойта (см. глава IV, конец параграфа 3), а для очень сильных полей, мы находим эффект Пашен - Бека, то-есть нормальное разложение Зеемана.

Таким образом, теория Дирака дает вполне удовлетворительное объяснение аномальному эффекту Зеемана для щелочных металлов. Для атомов же, где невозможно рассматривать один оптический электрон, теория Дирака не может в точности объяснить эффект Зеемана, так как она еще не может объяснить случая системы взаимодействующих электронов.

---

<sup>1)</sup> См. С. G. Darwin *Proc. Roy. Soc.* т. 118 (1928, стр. 654).



## Собственный и орбитальный момент. Поляризация электронных волн

### 1. Невозможность отделить собственный магнитный момент от орбитального магнитного момента (Бор)

Путем достаточно тонких рассуждений Бор показал, что собственный магнитный момент электрона невозможно измерить, так как эффекты, обусловленные существованием этого собственного момента, невозможно отделить от эффектов, обуславливаемых движением совокупности электронов.

Приведем рассуждение Бора. Чтобы обнаружить собственный магнетизм электрона, можно поступать двояким способом:

1. Пытаться измерить воздействие небольшого магнита, эквивалентного электрону, на магнетометр.

2. Заставить электрон пересечь неоднородное магнитное поле и попытаться исследовать действие этого поля на небольшой магнит.

Рассмотрим первый метод. Взяв направление движения электрона за ось  $x$ , мы помещаем магнетометр на оси  $y$  в точке с ординатой  $y$ . Чтобы иметь возможность с точностью записать выражение действий на магнетометр, мы должны предположить, что электрон достаточно локализован, то-есть, что этот электрон связан с пакетом волн  $\Psi$ , размеры которого должны быть малыми по сравнению с расстоянием магнетометра до оси движения. Например, если  $\Delta x$  есть длина этого пакета волн вдоль оси  $x$  (неопределенность абсциссы электрона), мы должны иметь:

$$\Delta x \ll y \quad (1)$$

а также

$$\Delta y \ll y \quad (1')$$

В таком случае, проходя у начала координат, электрон будет проявлять двоякого рода действие на магнетометр. Одно из этих действий обуславливается магнитным полем (орбитальное поле  $H_0$ ), создаваемым поступательным движением электрона. Его значение есть

$$H_0 = \frac{e v_x}{c y^2}. \quad (2)$$

Второе действие зависит от собственного магнитного момента электрона, который создает в месте, занятом магнетометром, собственное магнитное поле:

$$H_p = \frac{e h}{4 \pi m_0 c} \cdot \frac{1}{y^3}. \quad (3)$$

Но значение  $H_0$  с абсолютной точностью неизвестно. Оно, известно с неопределенностью:

$$\Delta H_0 = \frac{e}{c} \left| \frac{\Delta v_x}{y^2} + \frac{v_x}{y^3} \Delta y \right|, \quad (4)$$

поскольку обязательно существует неопределенность  $\Delta v_x$  в отношении составляющей  $x$  скорости электрона и неопределенность  $\Delta y$  в отношении его ординаты  $y$ <sup>1)</sup>. Но, согласно соотношений Гайзенберга, ограничиваясь ньютоновым приближением, мы имеем

$$\Delta v_x \geq \frac{h}{m_0 \Delta x} \quad \Delta v_y \geq \frac{h}{m_0 \Delta y} \quad (5)$$

а с другой стороны, мы должны всегда предполагать:

$$\Delta v_y \ll v_x, \quad (6)$$

без чего мы не имели бы движения, заметно проявляющегося вдоль оси  $x$ .

Если теперь мы сравним (3) и (4), мы найдем:

$$\left| \frac{\Delta H_0}{H_p} \right| = \frac{4\pi m_0}{h} (y \Delta v_x + v_x \Delta y), \quad (7)$$

откуда по (5), (1) и (6) выходит:

$$\left| \frac{\Delta H_0}{H_p} \right| \geq \left( \frac{y}{\Delta x} + \frac{v_x}{\Delta v_y} \right) \gg 1. \quad (8)$$

Таким образом, неопределенность в отношении орбитального магнитного поля всегда значительно больше, нежели значение собственного поля, а следовательно, магнетометр не даст нам возможности измерить собственный магнитный момент электрона.

Повторим такого же рода рассуждение в отношении действия неоднородного магнитного поля на электрон — магнит. Пусть электрон движется вдоль оси  $x$ ; вообразим магнитное поле, параллельное оси  $y$ , обладающее заметным градиентом  $\frac{\partial H}{\partial y}$ .

В начале координат магнитное поле имеет значение  $H(0)$ . Проходя возле начала, во время движения электрон подвергается действию электродинамической силы Лоренца, обусловленной орбитальным движением. Эта сила с большой точностью равна:

$$f_0 = e \frac{v_x}{c} \cdot H(0). \quad (9)$$

<sup>1)</sup> В формуле (4) в скобках должен быть знак +, так как в более благоприятном случае обе неопределенности могут складывать свои действия.

С другой стороны, магнит, которому эквивалентен электрон, подвергается действию силы (обусловленной собственным магнитным моментом):

$$f_p = \frac{eh}{4\pi m_0 c} \left( \frac{\partial H}{\partial y} \right)_{y=0}. \quad (10)$$

Но поскольку волновой пакет имеет ширину  $\Delta y$  и таким образом ордината электрона обладает этой неопределенностью, для значения  $f_0$  мы имеем неопределенность

$$|\Delta f_0| = \frac{e}{c} \left| v_x \left( \frac{\partial H}{\partial y} \right)_0 \Delta y + H(0) \Delta v_x \right| \quad (11)$$

откуда, сравнивая с (10):

$$\left| \frac{\Delta f_0}{f_p} \right| = \frac{4\pi m_0}{h} \left| v_x \Delta y + \left( \frac{H}{\frac{\partial H}{\partial y}} \right)_0 \Delta v_x \right| \quad (12)$$

Итак, поскольку соотношения (5) и (6) еще действительны, мы имеем:

$$\left| \frac{\Delta f_0}{f_p} \right| \geq \left| \frac{v_x}{\Delta v_x} + \left( \frac{H}{\frac{\partial H}{\partial y}} \right)_0 \cdot \frac{1}{\Delta x} \right| \gg 1. \quad (13)$$

Таким образом, действие внешнего неоднородного магнитного поля на электронный магнит совершенно маскируется неопределенностью в отношении силы Лоренца и этот метод также не дает нам возможности измерить собственный магнитный момент.

Следовательно, эти рассуждения, которые, к слову сказать, можно было бы усовершенствовать<sup>1)</sup>, доказывают невозможность непосредственного измерения собственного магнитного момента электрона.

## 2. Невозможность измерить собственный момент вращения

Те же рассуждения, как это в частности показал Дарвин, можно распространить на собственный момент вращения.

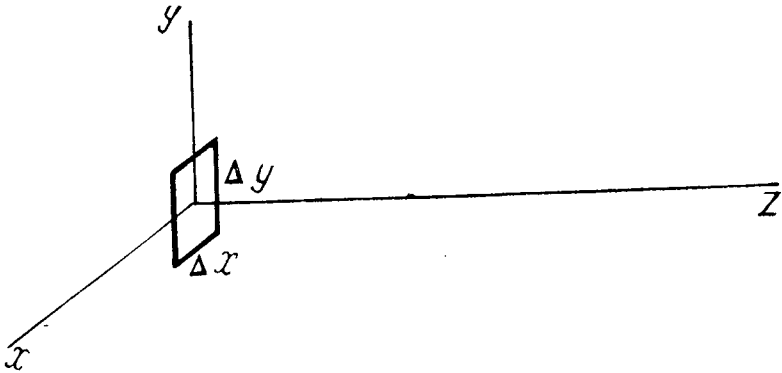
Вообразим, например, четырехугольное отверстие со сторонами  $\Delta x$  и  $\Delta y$ , прорезанное в плоском экране.

Заставим падать на этот экран с левой стороны электрон, связанный с монохроматической плоской волной; волновой пакет электрона вправо от экрана имеет размеры, соответственно сторонам  $\Delta x$  и  $\Delta y$ . Таким образом, составляющие  $x$  и  $y$  коли-

<sup>1)</sup> См. Darwin: *Examples of the Uncertainty Principle* (Proc. of the Royal Society, A, том 130, (1931), стр. 637) и доклад Паули Сольвеевскому Конгрессу 1930 (Готье-Виллар, изд.).

чества движения электрона после прохождения экрана обладают неопределенностями:

$$|\Delta p_x| \geq \frac{h}{\Delta x}; \quad |\Delta p_y| \geq \frac{h}{\Delta y}. \quad (14)$$



Фиг. 9

Составляющая  $z$  орбитального момента электрона, то-есть момента вращения, обусловленного его поступательным движением, есть:

$$M_z = x p_y - y p_x. \quad (15)$$

Таким образом, он имеет значение, лежащее между 0 и:

$$\Delta M_z = \Delta x |\Delta p_y| + \Delta y |\Delta p_x|, \quad (16)$$

откуда по (14):

$$\Delta M_z \geq h \left( \frac{\Delta x}{\Delta y} + \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) = h \cdot \frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{\Delta x \Delta y}. \quad (17)$$

Так как дробь, которая фигурирует в последнем члене (17) больше 1, мы отсюда выводим а fortiori:

$$\Delta M_z > \frac{h}{4\pi}. \quad (18)$$

Следовательно, неопределенность составляющей  $z$  орбитального момента вращения больше собственного момента вращения, а это делает иллюзорным измерение этой последней величины.

То же самое рассуждение можно применить к составляющим  $x$  и  $y$  собственного момента вращения.

Эти соображения, очевидно, показывают, что собственный момент вращения электрона не более измерим экспериментально, нежели его собственный магнитный момент.

## 3. Более общая теория

Предыдущие соображения можно связать с более общей точкой зрения, как это в частности показал Паули<sup>1)</sup>. Чтобы это понять, мы вкратце напомним метод приближения, так называемый „метод Бриллюэн - Вентцеля“.

В нерелятивистской волновой механике принцип метода Бриллюэн-Вентцеля<sup>2)</sup> состоит в предположении, что:

$$\Psi = e^{\frac{2\pi i}{h} S} \quad (19)$$

где:

$$S = S_0 + \frac{h}{2\pi i} S_1 + \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 S_2 + \dots + \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^n S_n + \dots \quad (20)$$

и в определении путем последовательных приближений членов  $S_0, S_1, \dots$ , которые фигурируют в разложении  $S$  по последовательным степеням количества с весьма малым модулем  $\frac{h}{2\pi i}$ . Если

в этом разложении удовлетвориться членами нулевого порядка, то-есть теми, которые останутся, когда  $h = 0$ , мы возвращаемся к геометрической оптике для волн  $\Psi$  и классической механике для соответствующей частицы, ибо в данном случае можно рассматривать группу волн весьма малых размеров, описывая один из лучей волны, и уподобить ее точечной частице прежней механики: волновые лучи и классические траектории совпадают.

Но если принять во внимание члены порядка  $1, 2, \dots$  по  $\frac{h}{2\pi i}$  в разложении (20), то мы увидим, что возникают особенности, которые противопоставляют волновую оптику геометрической оптике, новую механику — прежней.

Тот же самый метод приближения мы можем применить и в теории Дирака: это то, что сделал Паули. Здесь мы полагаем:

$$\Psi_k = e^{\frac{2\pi i}{h} S_k} \quad (k = 1, 2, 3, 4) \quad (21)$$

где

$$S_k = S_{0,k} + \frac{h}{2\pi i} S_{1,k} + \dots + \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^n S_{n,k} + \dots \quad (22)$$

и мы определим  $S_{i,k}$  при помощи последовательных приближений. Поступая так, мы увидим, что, если сохранить только члены нулевого порядка, мы получаем геометрическую оптику, которая соответствует *релятивистской волновой механике без*

<sup>1)</sup> *Helvetica Physica Acta*, том V, тетр. III, стр. 179.

<sup>2)</sup> См. L. Brillouin. *Exposés sur la théorie des Quanta*, гл. 1, изд. Германа.

*спина*, то - есть прежнюю механику в эйнштейновской форме. Тогда мы можем вообразить крайне малые потоки волн, описывающие лучи - траектории, которые совпадают с траекториями, предусмотренными эйнштейновской динамикой электрона. Эйнштейновская механика рассматривает электрон, как простую заряженную частицу, и пренебрегает „спином“. Таким образом, в приближении нулевого порядка механика Дирака приводит нас к релятивистской динамике электрона „без спина“. Это можно было предвидеть, поскольку собственный магнитный момент и собственный момент вращения электрона пропорциональны  $\hbar$  и исчезают, если пренебречь членами порядка  $\hbar$ .

Если, продолжая приближение, принять во внимание в уравнении (22) члены порядка 1, 2... по  $\frac{\hbar}{2\pi i}$ , мы увидим, что возникают члены, которые выражают существование магнетизма и собственного вращения электрона, но в то же время, как и в нерелятивистской теории, мы выходим из области применения геометрической оптики, и в результате точечные концепции прежней механики перестают быть точными.

Теперь мы понимаем, почему, согласно заключениям Бора, опыт, в котором с электроном возможно поступать, как с материальной точкой, не может привести к доказательству собственного магнитного момента или собственного вращения электрона. Действительно, согласно анализу Паули, было бы противоречием предполагать, что прежняя точечная механика здесь действительно и что здесь могут проявиться характеристические особенности „спина“.

#### 4. Поляризация электронных волн

Если кажется невозможным измерить магнитный момент электрона, рассматриваемого, как намагниченная частица, ничто не мешает а priori доказать экспериментальным путем поляризацию электронной волны  $\Psi$ , обусловленной существованием этого магнитного момента. Между тем, эта поляризация волн  $\Psi$  существенно отличается от классической поляризации световых волн. В то время как эта последняя для плоской волны определяется вектором, всегда осциллирующим нормально к направлению распространения, поляризация волн  $\Psi$  Дирака определяется вектором  $I$  „плотность магнитного момента“, и этот вектор в плоской волне, как мы это знаем, является постоянной и ориентирован как угодно по отношению к направлению распространения. В силу этого, в то время как рассматриваемые особенности поляризованного светового пучка в различных азимутах вокруг его направления распространения всегда имеют период  $\pi$ , для пучка волн  $\Psi$  Дирака соответствующий период есть  $2\pi$ .

Чтобы доказать поляризацию электронных волн, можно попытаться испробовать приспособления, аналогичные аппарату

Нерремберга в оптике. Возьмем неполяризованный пучек электронов, то-есть пучек, в котором векторы  $\vec{I}$ , относящиеся к различным электронам, ориентированы случайно. Если этот пучек заставить отражаться от кристаллического тела, по аналогии с оптикой мы приходим к выводу, что отраженный пучек мог бы быть частично поляризован. Если этот отраженный пучек заставить падать на второй рефлектор, второе отражение будет происходить с большей или меньшей интенсивностью в зависимости от азимута плоскости падения. Точная теория этого феномена представляется достаточно сложной и еще не вполне развита; мы на ней останавливаться здесь не будем. В общем мы приходим к предвидению очень слабого действия для электронов в несколько тысяч вольт, действию, которое должно расти вместе с энергией. С точки зрения экспериментальной этот феномен, очевидно, не наблюдаем с точностью. Рупп опубликовал фотографии, на которых ясно видно влияние азимута на второе отражение, но эти результаты, до сих пор другими исследователями не подтверждены и вопрос остается открытым<sup>1)</sup>.

---

<sup>1)</sup> Главные теоретические работы по поляризации электронов, это Mott (*Proc. Roy Soc. A.* 124 (1929), стр. 425 и A. 135, (1932), стр. 429). Полную библиографию можно найти в работе Thibaud, Trillat et v. Hirsch (*J. Phys.* VII. т. 33 (1932), стр. 314).

## Состояния с отрицательной энергией в теории Дирака

### 1. Плоская волна с отрицательной энергией

Теперь мы подходим к одной из больших трудностей, возникших в связи с теорией Дирака.

Перед этим мы изучали форму функций  $\Psi_k$  для плоской монохроматической волны в случае отсутствия поля (см. главу XII, параграф 3). Для этого мы писали уравнение Дирака с потенциалами, равными нулю, и получили решение формы:

$$\Psi_k = a_k e^{\frac{2\pi i}{h} Wt - p_x x - p_y y - p_z z} \quad (1)$$

Таким образом, мы нашли для  $a_k$  линейные и однородные уравнения:

$$\begin{aligned} \left(\frac{W}{c} + m_0 c\right) a_1 + (p_x + i p_y) a_4 + p_z a_3 &= 0 \\ \left(\frac{W}{c} + m_0 c\right) a_2 + (p_x - i p_y) a_3 - p_z a_4 &= 0 \\ \left(\frac{W}{c} - m_0 c\right) a_3 + (p_x + i p_y) a_2 + p_z a_1 &= 0 \\ \left(\frac{W}{c} - m_0 c\right) a_4 + (p_x - i p_y) a_1 - p_z a_2 &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Для того, чтобы решение не было нулевым, нужно, чтобы дегерминант уравнений (2) был нуль. Это дало нам условие:

$$\frac{W^2}{c^2} = m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, \quad (3)$$

которое представляет собой классическое релятивистское соотношение. Тогда, полагая:

$$W = +c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2} \quad (4)$$

мы нашли решение:

$$\begin{aligned} a_1 = -\frac{p_z A + (p_x + i p_y) B}{\frac{W}{c} + m_0 c}; \quad a_2 = -\frac{(p_x - i p_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} \\ a_3 = A; \quad a_4 = B \end{aligned} \quad (5)$$

где  $A$  и  $B$  произвольные комплексные константы.



Но мы могли бы точно также удовлетворить условие (3), полагая:

$$W = -c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}. \quad (6)$$

Тогда мы нашли бы следующее решение:

$$a_1 = C; a_2 = D; a_3 = \frac{p_z C + (p_x + i p_y) D}{m_0 c - \frac{W}{c}}$$

$$a_4 = \frac{(p_x - i p_y) C - p_z D}{m_0 c - \frac{W}{c}}, \quad (7)$$

где  $C$  и  $D$  — две произвольные комплексные константы.

Теперь мы слегка изменим обозначения, которые будем употреблять. Для данных значений  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$  впредь мы будем определять  $W$  по формуле (4) со знаком  $+$ , а чтобы учесть решение (7), мы будем рассматривать одновременно волну с энергией  $+W$  и волну с энергией  $-W$ . При этом новом условии в уравнениях (7) нужно  $W$  заменить на  $-W$ .

Короче говоря, для данного значения  $p_x$ ,  $p_y$  и  $p_z$ , при  $W$  определенном соотношением (4), мы будем рассматривать плоскую монохроматическую волну с положительной энергией  $+W$ , определяемую по:

$$\Psi_k = a_k \mathbf{e}^{\frac{2\pi i}{h} (Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \quad (8)$$

где

$$a_1 = -\frac{p_z A + (p_x + i p_y) B}{\frac{W}{c} + m_0 c}; \quad a_2 = -\frac{(p_x - i p_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c}$$

$$a_3 = A; a_4 = B \quad (9)$$

и плоскую монохроматическую волну с отрицательной энергией  $-W$ , определяемую по:

$$\Psi_k = a_k \mathbf{e}^{\frac{2\pi i}{h} (-Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} \quad (10)$$

где

$$b_1 = C; b_2 = D; b_3 = \frac{p_z C + (p_x + i p_y) D}{\frac{W}{c} + m_0 c};$$

$$b_4 = \frac{(p_x - i p_y) C - p_z D}{\frac{W}{c} + m_0 c}. \quad (11)$$

Теперь рассмотрим обе эти волны.

Для волны с положительной энергией, мы уже знаем, составляющие  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$ , которые соответствуют в некотором роде собственной положительной массе  $+m_0$ , берут верх над волнами  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , которые соответствуют собственной отрицательной массе  $-m_0$ . Эти волны  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , равные нулю, если скорость равна нулю, имеют значение только для скоростей достаточно близких к скорости света. И только в предельном случае  $v=c$  мы будем иметь:

$$|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 = |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2.$$

Иначе говоря, мы всегда имеем:

$$\Omega_1 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 - |\Psi_3|^2 - |\Psi_4|^2 \leq 0 \quad (12)$$

где знак равенства относится к предельному случаю  $v=c$ .

Для волны с отрицательной энергией заключения совершенно противоположны. Волны  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  здесь преобладают. Если электрон находится в состоянии покоя, то-есть если  $p_x, p_y$  и  $p_z$  равны нулю, то мы имеем:

$$\Psi_1 = C e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0 c^2 t}; \quad \Psi_2 = D e^{-\frac{2\pi i}{h} m_0 c^2 t}; \quad \Psi_3 = \Psi_4 = 0 \quad (13)$$

Для возрастающих скоростей волны  $\Psi_3$  и  $\Psi_4$  приобретают уже значение, но только для предельного случая  $v=c$  мы будем иметь равенство между

$$|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 \text{ и } |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2.$$

Таким образом здесь мы имеем:

$$\Omega \geq 0 \quad (14)$$

где знак равенства относится к предельному случаю  $v=c$ . Здесь берут верх волны, в некотором роде соответствующие собственной отрицательной массе.

Существование состояний с отрицательной энергией в теории Дирака представляет большую трудность для этой теории, так как электрон, будучи в таком состоянии, будет обладать странными свойствами, которые до сих пор не наблюдались. Помещенный в электрическое поле  $\vec{h}$ , он получит ускорение со знаком, противоположным знаку силы  $-e\vec{h}$ ; отнимая у него энергию, мы увеличим его скорость; его скорость по знаку будет обратна количеству движения<sup>1)</sup> и т. д.

Таким образом, теория Дирака, казалось бы, должна поста-

<sup>1)</sup> В силу соотношения  $v = \frac{\partial W}{\partial p}$ , которое выражает равенство скорости частицы и групповой скорости связанных с ней волн.

раться уничтожить эти состояния с отрицательной энергией, так как они кажутся несоответствующими действительности; но из соображений, которые мы сейчас изложим, это оказалось делом нелегким.

## 2. Неполный характер системы волн с положительной энергией

Мы обратимся к некоторым особенностям нерелятивистской волновой механики.

В нерелятивистской волновой механике волновое уравнение:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(\Psi) \quad (15)$$

представляет собой уравнение первого порядка по времени. Следовательно, решение этого уравнения целиком определяется, если мы знаем его первоначальную форму  $\Psi(x, y, z, 0)$ .

Рассмотрим случай отсутствия поля. Тогда уравнение (15) примет вид:

$$\Delta \Psi = -\frac{4\pi i m}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

и допускает как решение плоскую монохроматическую волну:

$$\Psi(x, y, z, t) = a e^{\frac{2\pi i}{h}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)} \quad (17)$$

где (без двойного знака):

$$E = \frac{1}{2m} \left[ p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right]. \quad (18)$$

Предположим, что мы задаемся первоначальной формой волновой функции:

$$\Psi(x, y, z, 0) = F(x, y, z). \quad (19)$$

Предположим далее, что  $F(x, y, z)$  разложимо в интеграл Фурье в форме:

$$\begin{aligned} F(x, y, z) &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p_x, p_y, p_z) e^{-\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} dp_x dp_y dp_z. \end{aligned} \quad (20)$$

Коэффициенты этого разложения можно вычислить, исходя из данной функции  $F$ , по формуле:

$$\begin{aligned} g(p_x, p_y, p_z) &= \\ &= \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(x, y, z) e^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} dx dy dz. \end{aligned} \quad (21)$$

Тогда можно утверждать, что функция:

$$\Psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p_x, p_y, p_z) e^{\frac{2\pi i}{h}(Et - p_x x - p_y y - p_z z)} dp_x dp_y dp_z. \quad (22)$$

Это очевидно поскольку:

1)  $\Psi$  есть решение уравнения (16), так как она является суммой плоских монохроматических решений этого линейного уравнения;

2) для  $t=0$  мы имеем  $\Psi(x, y, z, 0) = F(x, y, z)$ .

Отсюда мы выводим следующую теорему: „В нерелятивистской волновой механике свободной материальной точки плоские монохроматические волны составляют „полную“ систему, то-есть можно представить любое решение путем наложения таких волн“.

Перейдем теперь к теории Дирака и попытаемся перенести в нее эти рассуждения. Здесь для 4  $\Psi_k$  мы имеем систему из 4 уравнений первого порядка. Таким образом, эти 4 волновые функции целиком определяются, если задаться первоначальными формами  $\Psi_k(x, y, z, 0)$ .

Мы все еще берем случай поля равного нулю и при этом задаемся вопросом, возможно ли представить какое угодно решение путем наложения плоских монохроматических волн. Любое решение целиком определяется четырьмя функциями:

$$\Psi_k(x, y, z, 0) = F_k(x, y, z) \quad (k = 1, 2, 3, 4). \quad (23)$$

Допустим, что  $F_k$  даны произвольно и разлагаются по теореме Фурье в форме:

$$F_k(x, y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g_k(p_x, p_y, p_z) e^{-\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} dp_x dp_y dp_z, \quad (24)$$

причем  $g_k$  даны формулой:

$$g_k(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F_k(x, y, z) e^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} dx dy dz. \quad (25)$$

Путем наложения плоских монохроматических волн мы попытаемся представить решение, которое соответствует данным

первоначальным  $\Psi_k$  и будет содержать только волны с положительной энергией. Для этого мы положим:

$$\Psi_k(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_k(p_x, p_y, p_z) e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} dp_x dp_y dp_z \quad (26)$$

причем  $W$  определяется соотношением (4). Эти функции (26) дадут решение волнового уравнения, но для того, чтобы они приняли первоначальные формы  $F_k(x, y, z)$ , следовало бы иметь:

$$a_k(p_x, p_y, p_z) = g_k(p_x, p_y, p_z) \quad (\kappa = 1, 2, 3, 4) \quad (27)$$

причем  $g_k$  известно. Но мы знаем, что из четырех  $a_k(p_x, p_y, p_z)$  произвольно можно выбирать только два, а это показывает нам, что вообще нельзя удовлетворить условиям (27). Следовательно, плоские монохроматические волны с положительной энергией не образуют полной системы для электрона Дирака в отсутствие поля.

Наоборот, рассматривая наряду с плоскими волнами с положительной энергией также и плоские волны с отрицательной энергией, мы получаем полную систему. Действительно, если мы положим:

$$\begin{aligned} \Psi_k(x, y, z, t) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_k(p_x, p_y, p_z) e^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} dp_x dp_y dp_z \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} b_k(p_x, p_y, p_z) e^{\frac{2\pi i}{h}(-Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} dp_x dp_y dp_z, \end{aligned} \quad (28)$$

причем  $W$  всегда определяется по (4), мы будем иметь решения волновых уравнений, так как они линейны, и для того, чтобы первоначальные  $\Psi_k$  совпали с данными  $F_k(x, y, z)$ , мы должны написать условие:

$$a_k(p_x, p_y, p_z) + b_k(p_x, p_y, p_z) = g_k(p_x, p_y, p_z); \quad (\kappa = 1, 2, 3, 4). \quad (29)$$

Таким образом, в отличие от условий (27), условия (29) выполнимы, так как из 8  $a_k$  и  $b_k$ , которые соответствуют совокупности  $p_x, p_y, p_z$ , четыре — произвольны.

Если мы явно напишем условия (29), мы получаем для каждой совокупности  $p_x, p_y, p_z$  условия:

$$\begin{aligned}
 & \frac{(p_x + i p_y) A + p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} + C = g_1(p_x, p_y, p_z); \\
 & \frac{(p_x - i p_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c} + D = g_2(p_x, p_y, p_z); \\
 & \frac{p_z c + (p_x + i p_y) D}{\frac{W}{c} + m_0 c} + A = g_3(p_x, p_y, p_z); \\
 & \frac{(p_x - i p_y) C + p_z D}{\frac{W}{c} + m_0 c} + B = g_4(p_x, p_y, p).
 \end{aligned} \tag{30}$$

Если рассмотреть систему (30), принимая во внимание соотношения Гайзенберга, мы увидим, что в наиболее благоприятных случаях волновой пакет  $\Psi$  можно представить путем наложения волн с положительной энергией, но только в том случае, если размеры волнового потока значительно больше, чем  $\frac{h}{m_0 c}$ . Наоборот, если размеры волнового потока меньше  $\frac{h}{m_0 c}$ , вообще невозможно представить его путем наложения плоских волн без участия волн с отрицательной энергией.

Таким образом, вообще говоря, в теории Дирака невозможно представить какой-либо волновой пакет, не прибегая к волнам с отрицательной энергией, и эта невозможность показывает нам, как трудно исключить эти волны.

### 3. Парадокс Клейна

С первого взгляда может показаться, что трудность с отрицательными энергиями существует даже в классической теории относительности. Действительно, в классической теории относительности энергия определяется, как функция от количества движения в случае отсутствия поля из соотношения (3), соотношения, которое для  $W$  дает два значения:

$$W = \pm c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2} \tag{31}$$

Но нужно заметить, что по (31) возможные значения  $W$  находятся в двух отдельных областях от  $+\infty$  до  $+m_0 c^2$  и от  $-m_0 c^2$  до  $-\infty$ . Интервал от  $+m_0 c^2$  до  $-m_0 c^2$  не соответствует никакому возможному значению энергии. В прежней динамике, даже релятивистской, механические величины, и в частности энергия, вообще изменяются непрерывно. Таким образом, если вначале электроны имели свои энергии в положительной области

$m_0 c^2 \rightarrow +\infty$ , то так будет всегда, и никакое значение энергии из отрицательной области  $-m_0 c^2 \rightarrow -\infty$  не может появиться, так как обе области разделены интервалом  $\frac{1}{2} m_0 c^2 \rightarrow -m_0 c^2$ , который не могут пересечь значения энергии. Таким образом, возражения, выведенные из существования отрицательных энергий, в динамике Эйнштейна отпадают.

Того же нельзя сказать о новой механике, ибо она вообще признает возможность неожиданных переходов между состояниями, энергия которых различается на конечную величину, что не дает возможности а priori исключить переход из области положительных энергий в область отрицательных энергий. Больше того, легко себе представить простые примеры, где переходы такого рода осуществляются.

О. Клейн первый<sup>1)</sup> привел пример перехода, который, не представляя собой, собственно говоря, перехода из состояния положительной энергии в состояние отрицательной энергии, все же эквивалентен ему.

Клейн рассматривает плоскую поверхность  $S$ , которая разделяет область  $I$ , где потенциал равен нулю, от области  $II$ , где имеется постоянный отрицательный скалярный потенциал  $V$ , таким образом, что в области  $II$  электрон имеет потенциальную энергию  $U = -eV > 0$ . На разделяющую поверхность из области  $I$  падает нормально электронная волна Дирака; эта волна предполагается плоской монохроматической и соответствующей положительной энергии  $W$ . Необходимо вычислить отраженные и проходящие разделяющую поверхность волны. Можно показать, что для такого вычисления нужно сначала выразить, что каждая из четырех  $\Psi_k$  непрерывна на разделяющей поверхности, то-есть написать четыре уравнения:

$$\Psi_k \text{ падающая} + \Psi_k \text{ отраженная} = \Psi_k \text{ проходящая.} \quad (32)$$

Вполне естественно, что волны отраженные и проходящие соответствуют той же энергии, что и волна падающая: феномен консервативен.

Допустивши это, Клейн пришел к следующим результатам, которые я приведу без доказательств. Для  $0 < U < W - m_0 c^2$  имеется одновременно и отражение и прохождение, причем как проходящая, так и отраженная волна имеют нормальный характер волны с положительной энергией.

Для  $W - m_0 c^2 < U < W + m_0 c^2$  имеется полное отражение с волной, рассеивающейся во второй среде. Для  $U > W + m_0 c^2$  мы снова находим волну, проходящую сквозь поверхность, но, и это главное, она представляет собою волну с отрицательной энергией; очевидно, она соответствует полной энергии  $W$ , которая положительна, но которую можно назвать „энергией не потенциальной природы“ электрона области  $II$ , то-есть количество  $W - U$  отрицательно и меньше  $-m_0 c^2$ , в то время как в класси-

<sup>1)</sup> *Zeitschrift für Physik*, 53 (1929), стр. 157.

ческой эйнштейновой механике это количество всегда больше  $m_0 c^2$ . Волна, проходящая в среду II, где имеется скалярный потенциал  $V$ , аналогична волне с отрицательной энергией в отсутствии потенциала и обладает теми же парадоксальными свойствами. Существование этой проходящей волны нужно объяснить так: есть определенная вероятность, что падающий электрон проникает в область II, переходя в это странное состояние.

По Клейну, эта вероятность может быть даже значительной. Очевидно, что результат вычисления нельзя рассматривать как физически точный, в этом и заключается парадокс Клейна.

Правда, случай, рассматриваемый Клейном, крайне схематичен. Другие авторы рассматривали другие менее искусственные примеры. Общий результат этих исследований таков: каждый раз, когда потенциальная энергия электрона должна подвергаться изменению, по крайней мере, на  $m_0 c^2$  на расстоянии, меньшем

$\frac{h}{m_0 c}$ , есть возможность появления состояний с отрицательной энергией. Этот результат приводит к мысли, что, если бы можно было исключить из рассмотрения пространственные расстояния

меньше  $\frac{h}{m_0 c}$ , возможно, удалось бы исключить волны с отрицательной энергией. Это приближается к сказанному в конце предыдущего параграфа относительно представления волновых пакетов.

#### 4. Замечания и выводы

Состояния с отрицательной энергией, кроме того, странным способом вклиниваются в теорию рассеяния света электронами Дирака. Мы не будем развивать этой теории, отсылая читателя к другим трудам<sup>1)</sup>. Здесь мы отметим только вывод: электрон Дирака не мог бы рассеивать света, если бы он не мог находиться в состояниях с отрицательной энергией. Так как приходится принять, что электроны рассеивают свет, чтобы объяснить явления рассеяния материальными телами, это показывает точно так же, как трудно освободить теорию Дирака от того очевидного несовершенства, каким является существование состояний с отрицательной энергией. Тем не менее, делались различные попытки, чтобы устранить эту трудность. Мы скажем о них только несколько слов.

Шредингер предложил очень остроумное изменение общих уравнений Дирака, которое устранило бы состояния с отрицательной энергией<sup>2)</sup>. Но кроме того, что это изменение трудно совместимо с существованием рассеяния света электронами, оно точно также носит явно искусственный характер.

<sup>1)</sup> См. в особенности замечательную работу Е. Ферми *Quantum theory of radiation (Reviews of Modern Physics, т. IV, (1932), стр. 120)*.

<sup>2)</sup> См. в особенности *Annales de l'Institut Henri Poincaré, т. II, стр. 269*.



Вместо того, чтобы постараться устранить состояния с отрицательной энергией, Дирак, наоборот, пытался их объяснить<sup>1)</sup>. Для этого он предполагал, что эти состояния существуют в действительности, и что в каждой части пространства имеется бесконечное число электронов, занимающих все эти состояния с отрицательной энергией, электронов, которые ненаблюдаемы. Некоторые из этих электронов от времени до времени покидают свое обычное состояние с отрицательной энергией, чтобы занять состояние с положительной энергией, и эти электроны наблюдаемы. „Дырка“, оставленная в состояниях с отрицательной энергией уходом электрона, и будет то, что мы называем протоном. Возвращение ушедшего электрона в состояние с отрицательной энергией будет означать одновременное исчезновение электрона и протона, исчезновение, которое должно сопровождаться испусканием радиации. К несчастью, эти соблазнительные гипотезы встречают массу возражений и не могут быть сохранены<sup>2)</sup>.

<sup>1)</sup> Там же т. 1, стр. 357.

<sup>2)</sup> Главным возражением, выдвигавшимся против теории „дырок“ Дирака, было то обстоятельство, что масса электрона и „масса дырки“ должны непременно быть равными, в то время как массы электрона и протона совершенно различны. Другим возражением являлось то, что „дырка“ должна иметь, как показывает вычисление, весьма незначительную продолжительность существования, в виду большой вероятности ее взаимной „аннигиляции“ с каким-нибудь электроном с положительной энергией. Однако, оба эти возражения отпали после открытия частицы с массой, равной массе электрона, но с положительным зарядом („позитрон“). Это открытие дало возможность отождествить „дырки“ Дирака не с протонами, а с позитронами. Последние, как показывает эксперимент, действительно имеют весьма малую продолжительность существования. На основании теории „дырок“ оказалось возможным объяснить и предсказать ряд эффектов, заключающихся в образовании электронов и позитронов при различных процессах, как, например, столкновение двух материальных частиц, ядра с фотоном и т. п. Эти явления заключаются в том, что под влиянием внешнего возмущения электрон, находившийся в состоянии с отрицательной энергией, переходит в состояние с положительной энергией, причем получится обычный электрон и „дырка“, т. е. позитрон.

Таким образом, наличие у уравнения Дирака решений с отрицательной энергией представляется в настоящее время благодаря теории „дырок“ не недостатком, а скорее достоинством теории. Надо, однако, отметить, что теория „дырок“ (как и вообще теория Дирака) в ее теперешнем виде не может считаться окончательной. В частности, она наталкивается на серьезные трудности, связанные с бесконечной плотностью распределения электронов с отрицательной энергией в пространстве, которые, с другой стороны, никак не обнаруживают своего присутствия. Попытки обойти эти трудности, сделанные в последнее время Дираком, Гайзенбергом и Шайерльсом, еще не привели к определенным удовлетворительным результатам.

„Дрожание“ Шредингера

1. Движение центра тяжести вероятности

В этой главе мы будем избегать явно вводить оператор, соответствующий „скорости“ электрона. Скорость частицы является обозначением, которое, как это заметил Бор, нужно употреблять в новой механике с осторожностью. Она является определенной только в некоторых случаях, и представляется неоправданным рассматривать ее, как физически наблюдаемую величину.

Наоборот, всегда можно рассматривать среднее положение частицы или центр тяжести вероятности и изучать его движение. Действительно, эта точка в теории Дирака определяется ее координатами:

$$\begin{aligned} x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa}^* \Psi_{\kappa} d\tau; & \bar{y} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa}^* \Psi_{\kappa} d\tau; \\ \bar{z} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} z \sum_{\kappa}^4 \Psi_{\kappa}^* \Psi_{\kappa} d\tau. \end{aligned} \quad (1)$$

Скорость точки с координатами  $\bar{x}$ ,  $\bar{y}$ ,  $\bar{z}$  является вполне определенным количеством.

Пусть  $(\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)$  будет решением уравнения Дирака, которое представляет волну, связанную с движением определенного электрона. Мы можем, как это нам известно, разложить каждую  $\Psi_{\kappa}$  в ряд по собственным функциям в форме:

$$\Psi_{\kappa} = \sum_n c_n \Psi_{\kappa, n}, \quad (2)$$

причем  $c_n$  представляют собой комплексные постоянные. Подставляя в (1), мы имеем:

$$\bar{x} = \sum_{m, n} c_m^* c_n \int_D \sum_{\kappa}^4 (\Psi_{\kappa, m}^* x \Psi_{\kappa, n}) d\tau, \quad (3)$$

замещая одним знаком тройные интегралы формул (1). Обозначая через  $x_{mn}$  элемент с индексами  $m, n$  матрицы, соответствующей оператору  $x$ , формулу (3) мы запишем просто как:

$$\bar{x} = \sum_{m, n} c_m^* c_n x_{mn}. \quad (4)$$

Далее, в силу формулы (25) главы XV мы имеем:

$$\frac{d x_{mn}}{d t} = \int_D \sum_1^4 \left| \Psi_{k,m}^* \frac{2\pi i}{h} (xH - Hx) \Psi_{k,n} \right| d\tau, \quad (5)$$

где  $H$  есть гамильтонов оператор Дирака:

$$H = -[eV + c(\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + \alpha_3 P_3 + \alpha_4 m_0 c)] \quad (6)$$

Мы легко находим:

$$\frac{2\pi i}{h} (xH - Hx) = c\alpha_1 \left( x \cdot \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \cdot x \right) = -c\alpha_1, \quad (7)$$

а следовательно:

$$\frac{d x_{mn}}{d t} = \int_D \sum_1^4 \left[ \Psi_{k,m}^* (-c\alpha_1) \Psi_{k,n} \right] d\tau. \quad (8)$$

Таким образом из (4) мы получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d x}{d t} &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \frac{d x_{mn}}{d t} = \int_D \sum_1^4 \left[ \sum_m c_m^* \Psi_{k,m}^* (-c\alpha_1) \sum_n c_n \Psi_{k,n} \right] d\tau = \\ &= \int_D \sum_1^4 \Psi_k^* (-c\alpha_1) \Psi_k d\tau. \end{aligned} \quad (9)$$

Вполне естественно, мы точно также найдем:

$$\frac{d \bar{y}}{d t} = \int_D \sum_1^4 \Psi_k^* (-c\alpha_2) \Psi_k d\tau; \quad \frac{d \bar{z}}{d t} = \int_D \sum_1^4 \Psi_k^* (-c\alpha_3) \Psi_k d\tau. \quad (10)$$

Уже раньше (формулы (7) главы XII) мы нашли следующие выражения для составляющих потока вероятности:

$$\rho u_x = -c \sum_1^4 \Psi_k^* \alpha_1 \Psi_k d\tau. \quad (11)$$

Следовательно, сравнивая с (9), мы имеем:

$$\frac{d \bar{x}}{d t} = \int_D \rho u_x d\tau = \bar{u}_x \quad (12)$$

и точно также:

$$\frac{d \bar{y}}{d t} = \bar{u}_y, \quad \frac{d \bar{z}}{d t} = \bar{u}_z. \quad (12')$$

Таким образом, скорость центра тяжести вероятности равна среднему значению скорости вероятности, результат, который можно было предвидеть *a priori*.

Часто формулы (9) и (10) объясняют, говоря, что операторы  $-c\alpha_1$ ,  $-c\alpha_2$  и  $-c\alpha_3$  суть операторы, соответствующие трем составляющим скорости электрона. Так как эти операторы для собственных значений имеют только  $+c$  и  $-c$ , мы, согласно общих принципов новой механики, говорим, что единственными возможными значениями составляющих скорости являются  $+c$  и  $-c$ , результат, понять который довольно трудно. Мы предпочитаем, как мы уже говорили, воздерживаться от приведения в соответствие операторов — „скорости“ частицы.

## 2. Теорема Эренфеста в теории Дирака уже неточна

В нерелятивистской волновой механике мы уже приводили теорему Эренфеста, которая выражается формулами:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = \bar{f}_x; \quad m \frac{d^2 y}{dt^2} = \bar{f}_y; \quad m \frac{d^2 z}{dt^2} = \bar{f}_z. \quad (13)$$

Примененная к случаю отсутствия поля, эта теорема приводит нас к следующему результату: „В отсутствие поля движение центра тяжести вероятности прямолинейно и равномерно.“ Это является в некотором роде перенесением в волновую механику принципа инерции.

В теории Дирака этот вывод вообще не точен. Действительно, возьмем формулу (8) и применим еще формулу (25) главы XV; мы получаем:

$$\frac{d^2 x_{mn}}{dt^2} = \int_D \sum_k^4 \left[ \Psi_{k,m}^* \cdot \frac{2\pi i}{h} (-c\alpha_1 H + H c\alpha_1) \cdot \Psi_{k,n} \right] \cdot d\tau, \quad (14)$$

а следовательно по (4):

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \sum_{m,n} c_m^* c_n \int_D \sum_k^4 \left[ \Psi_{k,m}^* \cdot \frac{2\pi i}{h} (-c\alpha_1 H + H c\alpha_1) \Psi_{k,n} \right] \cdot d\tau, \quad (15)$$

Но  $\alpha_1$  не коммутирует с  $H$ , поскольку она антикоммумутативна с  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$  и  $\alpha_4$ . Следовательно, вообще мы имеем

$$\frac{d^2 x}{dt^2} \neq 0, \quad \text{а также:} \quad \frac{d^2 y}{dt^2} \neq 0; \quad \frac{d^2 z}{dt^2} \neq 0. \quad (16)$$

Движение центра тяжести вероятности в отсутствие поля, вообще говоря, — непрямолинейно и неравномерно.

Теперь мы подробно рассмотрим причину, которая мешает этому движению центра тяжести быть прямолинейным и равномерным, и мы увидим, что это связано с существованием состояний с отрицательной энергией. Таким образом мы будем иметь в иной форме результаты, уже полученные Шредингером<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> *Annales de l'Institut H. Poincaré*, loc. cit.

## 3. „Дрожание“ Шредингера

Чтобы как следует понять, почему движение центра тяжести вероятности, даже в отсутствии поля, вообще не является в механике Дирака движением прямолинейным и равномерным, мы подвергнем подробному анализу выражение:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \int_D \sum_k^4 \Psi_k^* (-c \alpha_1) \Psi_k d\tau. \quad (17)$$

Мы знаем, что всегда можно написать:

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z, t) = & \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int \left| a_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} [Wt - p_x x - p_y y - p_z z]} \right. \\ & \left. + b_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} [-Wt - p_x x - p_y y - p_z z]} \right| dp_x dp_y dp_z, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$W = +\sqrt{m_0^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}. \quad (19)$$

Восемь  $a_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z)$  и  $b_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z)$  могут быть вычислены, исходя из произвольно взятых четырех из них, при помощи формул, нам уже известных.

Назовем теперь „пространством моментов“ пространство, в котором прямоугольными координатами служат величины  $p_x p_y p_z$ , и разделим это пространство на сколь угодно малые ячейки  $\sigma$ . Количества:

$$\Delta(\sigma) = \int \int \int e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z)} dp_x dp_y dp_z \quad (20)$$

представляют собой (с точностью до постоянной нормировки) „собственные дифференциалы“ сплошного спектра плоских монохроматических волн<sup>1)</sup>, и мы можем написать:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z, t) = \sum_{\sigma} \left| a_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} Wt} + b_{\mathbf{k}}(p_x p_y p_z) e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} Wt} \right| \Delta(\sigma), \quad (21)$$

причем  $p_x p_y p_z$  представляют собой координаты центра элемента  $\sigma$  в пространстве моментов, а  $\sum_{\sigma}$  — суммирование по всем ячейкам  $\sigma$  в этом пространстве.

<sup>1)</sup> См. определение собственных дифференциалов в главе V, параграф 4.

А раз это так, мы можем написать (17) в виде:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = -c \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \sum_1^4 \left| a_k(p'_x p'_y p'_z) e^{\frac{2\pi i}{h} W t} + b_k(p'_x p'_y p'_z) e^{-\frac{2\pi i}{h} W t} \right|^* \cdot x_1 \left| a_k(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{h} W t} + b_k(p_x p_y p_z) e^{-\frac{2\pi i}{h} W t} \right| \cdot \int_D \Delta^*(\sigma') \Delta(\sigma) d\tau. \quad (22)$$

Вполне естественно, что областью здесь является все пространство целиком. Так как собственные дифференциалы — ортогональны и могут предполагаться нормированными, мы имеем<sup>1)</sup>:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = -c \sum_{\sigma} \sum_1^4 \left| a_k(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{h} W t} + b_k(p_x p_y p_z) e^{-\frac{2\pi i}{h} W t} \right|^* \cdot x_1 \cdot \left| a_k(p_x p_y p_z) e^{\frac{2\pi i}{h} W t} + b_k(p_x p_y p_z) e^{-\frac{2\pi i}{h} W t} \right| \quad (23)$$

или еще:

$$\frac{dx}{dt} = -c \sum_{\sigma} \sum_1^4 [a_k^* x_1 a_k + b_k^* x_1 b_k] - c \sum_{\sigma} \left( \sum_1^4 a_k^* x_1 b_k e^{-\frac{4\pi i}{h} W t} + \sum_1^4 b_k^* x_1 a_k e^{\frac{4\pi i}{h} W t} \right) \quad (24)$$

Теперь нужно преобразовать это выражение. По формулам предыдущей главы мы имеем:

$$a_1 = -\frac{p_z A + (p_x - ip_y) B}{\frac{W}{c} + m_0 c}; \quad a_2 = -\frac{(p_x - ip_y) A - p_z B}{\frac{W}{c} + m_0 c};$$

$$a_3 = A; \quad a_4 = B, \quad (25)$$

откуда:

$$-c \sum_1^4 a_k^* x_1 x_k = -c (a_1^* a_4 + a_2^* a_3 + a_3^* a_2 + a_4^* a_1) = = 2 p_x c^2 \frac{AA^* + BB^*}{\frac{W}{c} + m_0 c^2} \quad (26)$$

Но мы имеем точно также:

$$\sum_1^4 a_k^* a_k = (AA^* + BB^*) \left( 1 - \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\left( \frac{W}{c} + m_0 c \right)^2} \right) = 2 W \frac{AA^* + BB^*}{\frac{W}{c} + m_0 c^2}, \quad (27)$$

<sup>1)</sup> Через  $\sigma$  мы здесь обозначаем объем ячейки  $\tau$ .

откуда, сравнивая с (26):

$$-c \sum_k^4 a_k^* z_1 a_k = \frac{p_x c^2}{W} \sum_k^4 a_k^* a_k. \quad (28)$$

Пользуясь выражением для  $b_k$ , мы точно также найдем:

$$-c \sum_k^4 b_k^* z_1 b_k = -\frac{p_x c^2}{W} \sum_k^4 b_k^* b_k. \quad (29)$$

С другой стороны, два последние члена выражения (24) комплексно сопряженные (в силу эрмитности  $z_1$ ) и могут быть написаны, как:

$$c \sum_{\sigma} \sigma A_1 \cos\left(\frac{4\pi}{h} Wt + \varphi_1\right). \quad (30)$$

Вполне естественно,  $A_1$  и  $\varphi_1$  изменяются от ячейки к ячейке, то есть представляют собой функции от  $p_x p_y p_z$ .

В конечном счете по (28), (29) и (30) мы можем написать (24) в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{dt} = & \sum_{\sigma} \sigma \frac{c^2 p_x}{W} \left( \sum_k^4 a_k^* a_k - \sum_k^4 b_k^* b_k \right) + \\ & + \sum_{\sigma} \sigma c A_1 \cos\left(\frac{4\pi}{h} Wt + \varphi_1\right). \end{aligned} \quad (31)$$

Далее, по формулам релятивистской динамики, величина  $\frac{c^2 p_x}{W}$  представляет собой составляющую  $x$  скорости, соответствующей количеству движения  $p_x$  и энергии  $+W$ . Точно также и  $-\frac{c^2 p_x}{W}$  можно считать составляющей  $x$  скорости, соответствующей отрицательной энергии  $-W$ . Таким образом, первый член в выражении (31)  $\frac{d\bar{x}}{dt}$  представляет собой некоторого рода среднее значение составляющей скорости  $v_x$ , соответствующей спектральному составу (18) волны  $\Psi$ . Следовательно мы полагаем:

$$\bar{v}_x = \sum_{\sigma} \sigma \frac{p_x c^2}{W} \sum_k^4 (a_k^* a_k - b_k^* b_k) \quad (32)$$

$\bar{v}_x$ , естественно, не зависит от времени. Таким образом мы имеем:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \bar{v}_x + \sum_{\sigma} \sigma c A_1 \cos\left(\frac{4\pi}{h} Wt + \varphi_1\right). \quad (33)$$

откуда после интегрирования:

$$\bar{x} = \text{const} + \bar{v}_x t + \sum_{\sigma} \sigma \frac{hc A_1}{4\pi W} \sin\left(\frac{4\pi}{h} Wt + \varphi_1\right). \quad (34)$$

Мы полагаем:

$$\xi = \text{const} + \bar{v}_x t. \quad (35)$$

Получается:

$$\bar{x} = \xi + \sum_{\sigma} \frac{hc A_1}{4\pi W} \sin \left[ 2\pi \cdot \frac{2W}{h} \cdot t + \varphi_1 \right]. \quad (36)$$

Точно также мы найдем:

$$\begin{aligned} \bar{y} &= \eta + \sum_{\sigma} \frac{hc A_2}{4\pi W} \sin \left[ 2\pi \cdot \frac{2W}{h} t + \varphi_2 \right]; \\ \bar{z} &= \zeta + \sum_{\sigma} \frac{hc A_3}{4\pi W} \sin \left[ 2\pi \cdot \frac{2W}{h} t + \varphi_3 \right] \end{aligned} \quad (37)$$

при определениях:

$$\begin{aligned} \eta &= \bar{v}_y t + \text{const}; \quad \bar{v}_y = \sum_{\sigma} \frac{p_y c^2}{W} \cdot \sum_k (a_k^* a_k - b_k^* b_k) \\ \zeta &= \bar{v}_z t + \text{const}; \quad \bar{v}_z = \sum_{\sigma} \frac{p_z c^2}{W} \cdot \sum_k (a_k^* a_k - b_k^* b_k). \end{aligned} \quad (38)$$

Точка с координатами  $\xi, \eta, \zeta$  движется прямолинейно и равномерно, а центр тяжести вероятности совершает вокруг этой точки колебания с частотами  $\frac{2W}{h}$ . Это „дрожание Шредингера“. Впрочем, амплитуды этих колебаний вообще слабы, так как они пропорциональны множителю  $\frac{hc}{4\pi W}$ , который всегда гораздо меньше  $\frac{hc}{4\pi m_0 c^2} = \frac{1}{4\pi} \frac{h}{m_0 c}$ ; ибо количество  $\frac{h}{m_0 c}$ , часто называемое „длиною волны Комптона“, весьма мало ( $2,4 \cdot 10^{-10}$  см).

Преыдуший анализ ясно показывает происхождение дрожания Шредингера. Оно происходит от биений волн с положительной энергией  $W$  и соответствующих волн с отрицательными энергиями  $-W$ . Частота биений, как обычно, есть разность частот бьющихся волн, то - есть в данном случае  $\frac{2W}{h}$ .

Для волнового пакета, в спектральном разложении которого не фигурирует ни одной волны с отрицательной энергией, не наблюдается дрожания Шредингера и теорема Эренфеста действительна. Но мы знаем, что в общем случае, чтобы представить волновой пакет, нужно обратиться к волнам с отрицательной энергией. Вот почему теорема Эренфеста, вообще, не действительна в теории Дирака.

Следовательно, дрожание Шредингера и недействительность теоремы Эренфеста связаны с существованием состояний с отрицательной энергией и исчезли бы вместе с ними, если бы эти последние можно было устранить.



## Несколько замечаний о теории относительности и новой механике

### 1. Отсутствие в новой механике симметрии между пространством и временем

Мы видели, что теория Дирака с некоторых точек зрения согласуется с принципом относительности. Действительно, его основным уравнениям можно придать форму, инвариантную по отношению к преобразованиям Лоренца: при помощи его четырех  $\Psi$  можно образовать величины, которые имеют тензорный характер в пространстве-времени. Тем не менее, совершенно невозможно претендовать на то, чтобы теория Дирака в ее нынешнем состоянии целиком согласовывалась с концепциями относительности. Одной из ведущих идей теории относительности является то, что она всегда заставляет пространственные и временные координаты входить в уравнение симметрично. Но в теории Дирака эта симметрия переменных  $x, y, z, t$  не осуществляется, так как мы принимаем в ней общие принципы новой механики, общие принципы, которые, по крайней мере в их настоящей форме, придают совершенно особую роль переменной „время“. Мы должны остановиться на этом моменте.

Новая механика каждой наблюдаемой физической величине приводит в соответствие свой эрмитовый оператор. Так как эрмитность оператора определяется в области *пространства*, уже одного этого достаточно, чтобы определение даже операторов, употребляющихся в новой механике, не было релятивистским. Время может фигурировать в этих операторах только в качестве параметра, а производные  $\frac{\partial^n}{\partial t^n}$  никогда не могут в них фигурировать.

Определив операторы, которые соответствуют наблюдаемым величинам, новая механика принимает, что возможные значения каждой из этих величин даются собственными значениями ее оператора. А собственные значения и собственные функции операторов, в свою очередь, определяются в области пространства. Переменная „время“ не играет никакой роли в вычислении собственных значений и собственных функций эрмитового оператора; если она в них фигурирует, то только в качестве параметра. Вычисливши таким образом возможные значения наблюдаемой величины  $A$ , новая механика принимает, что соответствующие вероятности различных возможных значений этой величины даются квадратом модулей коэффициента каждой собственной

функции в разложении волновой функции  $\Psi$  по этим собственным функциям.

В общем случае<sup>1)</sup> эти вероятности зависят от параметра  $t$  и именно поэтому изменяется вообще состояние системы.

Короче говоря, новая механика до сих пор рассматривает время, как играющее роль, совершенно отличную от роли пространственных координат. Таким образом, теория Дирака, которая принимает общие принципы новой механики, не может быть в действительности „релятивистской“. Это легко видеть, например, изучая средние значения величин в механике Дирака. Плотности среднего значения определяются в пространстве и, чтобы перевести плотность в среднее значение, нужно проинтегрировать по пространству: действие, которое не является инвариантным в релятивистском понимании. Так можно объяснить некоторые очень явные особенности на таблице средних значений, которая находится в конце второй части настоящей книги, как, например, асимметричное вхождение оператора  $z_4$ .

## 2. Четвертое соотношение неопределенности

Мы затронем еще один вопрос, который связан с особой ролью, которую играет время в волновой механике.

Соотношения неопределенности Гайзенберга следующие:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h; \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq h; \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq h. \quad (1)$$

С математической точки зрения они происходят из того факта, что волновая механика ставит в соответствие (с точностью до постоянной) классическим величинам  $p_x p_y p_z$  производные соответственно по сопряженным переменным  $x, y, z$ .

С физической точки зрения соотношение (1) нужно объяснить так: в данный момент произведение неопределенности одной из координат частицы на неопределенность сопряженной составляющей количества движения всегда по меньшей мере порядка  $h$ .

Релятивистская симметрия между пространством и временем требовала бы, чтобы три соотношения (1) были дополнены четвертым соотношением:

$$\Delta W \cdot \Delta t \geq h, \quad (2)$$

поскольку энергия  $W$  есть временная составляющая пространственно-временного четырехмерного вектора импульса, пространственные составляющие которого суть  $p_x p_y p_z$ .

Но при современном состоянии новой механики это четвертое соотношение неопределенности совершенно не может быть истолковано таким же образом, как и три первые, ибо, с одной стороны, время  $t$  должно рассматриваться, как параметр, имеющий

<sup>1)</sup> То есть, когда  $A$  не является первым интегралом.

вполне определенное значение без всякой неопределенности, а с другой стороны, величина „энергия  $W$ “ соответствует гамильтоновому оператору, а не оператору  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ , который не может рассматриваться, как эрмитовый в собственном смысле слова.

Тем не менее, равенству (2) можно придать смысл. Действительно, известно, что, если мы наблюдаем прохождение волны в одном определенном пункте пространства в течение какого-нибудь конечного времени  $\Delta t$ , мы можем утверждать, что эта волна обладает частотой  $\nu$  только с неопределенностью:

$$\Delta \nu \gg \frac{1}{\Delta t}. \quad (3)$$

Принимая во внимание соотношение  $W = h\nu$  для волны  $\Psi$ , мы можем написать неравенство (3) в виде:

$$\Delta W \geq \frac{h}{\Delta t}. \quad (4)$$

Тогда мы замечаем смысл соотношения (2). Оно выражает, что опыт или наблюдение, произведенные в определенной точке в течение времени  $\Delta t$ , не в состоянии определить энергию частицы с неопределенностью меньшей  $\frac{h}{\Delta t}$ .

Таким образом, четвертое соотношение неопределенности имеет смысл, но смысл очень отличный от смысла первых трех. В этом заключается новый аспект асимметрии между пространством и временем в волновой механике.

### 3. Возможно ли в новой механике восстановить симметрию между пространством и временем?

Чтобы установить симметрию между пространством и временем в новой механике, нужно попытаться изменить в этом смысле формулировку общих принципов. Не утверждая, что это невозможно, мы покажем, что это наталкивается на большие трудности.

Первое, что нужно сделать, это определить эрмитность операторов в пространстве-времени вместо определения в пространстве. Пусть, например, оператор  $A$  может одновременно действовать на переменные времени и пространства (а также при случае и на переменную спина  $\zeta$ ). Тогда эрмитность определилась бы по условию:

$$\begin{aligned} & \int \int \int \int_D f^*(x, y, z, t) A g(x, y, z, t) dx dy dz dt = \\ & = \int \int \int \int_D g(x, y, z, t) A^* f^*(x, y, z, t) dx dy dz dt, \end{aligned} \quad (5)$$

причем  $D$  есть область пространства - времени; для свободного электрона — все пространство - время целиком.

При случае в условии (5) могло бы иметь место суммирование по переменной  $\zeta$ .

Тогда собственные значения и собственные функции оператора  $A$  определились бы из уравнения:

$$A[\varphi_i(x, y, z, t)] = \alpha_i \varphi_i(x, y, z, t); \quad (6)$$

при этом  $\varphi_i$  конечна, однозначна, непрерывна и равна нулю на границах области  $D$  пространства - времени. Волновая функция  $\Psi(x, y, z, t)$  разложилась бы в виде:

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_i c_i \varphi_i(x, y, z, t) \quad (7)$$

и тогда можно было бы обычную формулировку общих принципов изменить так: „Измерение физической величины, соответствующей оператору  $A$ , может дать только одно из значений  $\alpha_i$  и вероятность значения  $\alpha_k$  равна  $|c_k|^2$ “. Отсюда вытекало бы, что среднее значение величины  $A$  было бы:

$$\bar{A} = \iiint_D \Psi^* A(\Psi) dx dy dz dt. \quad (8)$$

К несчастью, все это встречает сильные возражения. Количества  $\alpha_i$  и  $c_i$  были бы, согласно их новым определениям, независимы от времени и, естественно, то же было бы и с  $\bar{A}$ . Таким образом, мы получили бы статическую физику, вследствие чего была бы устранена всякая эволюция во времени.

Вторая трудность заключается в следующем. Если при современных принципах новой механики мы „квантуем“ систему, например, атом водорода, мы мысленно изолируем эту систему от всего окружающего мира. Строго говоря, это невозможно. Для определения  $\Psi$  принципиально нужно учитывать не только силовое поле, созданное ядром, но и все силовые поля, существующие в окружающем мире. К счастью; влияние силовых полей вне атома на форму стационарных волн  $\Psi$  внутри атома совершенно ничтожно, так как эти волны очень быстро стремятся к нулю, как только мы удаляемся из области атома. В принципе определение стационарных волн собственных функций требует рассмотрения всего пространства и всего, что в нем содержится, а практически структура материального мира определяется тем, что именно мы возьмем из систем, достаточно независимых от остального материального мира, чтобы можно было их рассматривать изолированно. Но если мы захотим определить собственные функции в пространстве - времени, то дело будет обстоять иначе, так как совершенно невозможно разделить существование физического тела такого, как атом, на части, независимые одна от другой. Возьмем атом водорода. На про-

тяжении своей истории он будет подвергаться различным действиям, например, эффекту Штарка или эффекту Зеемана. Если мы хотим определить функции и собственные значения в пространстве-времени, мы найдем, что стационарные состояния этого атома будут неизменны и определяются совокупностью всех действий, которым он подвергался на протяжении всего времени. А это представляется совершенно неприемлемым.

Действительно, даже в теории относительности в ее теперь уже классической форме переменные времени и пространства далеко не эквивалентны. Переменная „время“ изменяется в ней всегда в одном и том же смысле, а мировые линии всех материальных тел представляют собой линии, имеющие положительное направление, которое всегда образует с осью  $ct$  угол, по крайней мере, в  $45^\circ$ . Иначе говоря, пространство-время обладает существенной „полярностью“.

В релятивистском представлении наблюдатель А рассматривает, как одновременные и соответствующие тому же самому значению их собственного времени, мировые точки, которые содержатся в определенной области трех измерений пространства-времени. Это наблюдается в силу того, что эта область перерезывает все мировые линии, которые наблюдатель А может отрезать в своем пространстве с независимыми единицами. Но по смыслу мировых линий такое отрезывание невозможно. Имеется некоторого рода „фиброзная структура“ пространства-времени в смысле времени. Именно эта „фиброзная структура“ и затрудняет нас, и мы видим, что трудность имеет свой корень в самой классической теории относительности.

#### 4. Более строгая форма соотношений неопределенности (Бор, Ландау, Пайерлс)

Соотношение  $\Delta W \cdot \Delta t \geq h$ , если в него ввести релятивистскую идею, что никакое действие не может распространяться со скоростью большей  $c$ , приводит к формулированию новых соотношений неопределенности. Эти новые соотношения, не содержащиеся в общих принципах новой механики в ее нерелятивистской форме, прибавляются к соотношениям Гайзенберга и усиливают неопределенности, которые из них вытекают.

Не входя в подробности рассуждений, которые приводят к этим новым неопределенностям, мы, однако, попытаемся показать их происхождение. Возьмем случай отсутствия поля. В релятивистской волновой механике четыре параметра  $W, p_x, p_y, p_z$ , которые фигурируют в фазе плоской монохроматической волны, связаны соотношением эйнштейновой динамики:

$$|p|^2 = \frac{W^2}{c^2} - m_0^2 c^2, \quad (9)$$

откуда легко выводится  $\Delta|p| \geq \frac{\Delta W}{c}$ .

Но мы знаем, что если пытаться определить состояние электрона путем опыта в течение  $\Delta t$ , то нам это удастся только с неопределенностью  $\frac{h}{\Delta t}$ , то-есть, что разложение волны  $\Psi$  на монохроматические волны охватывает спектральный интервал:

$$\Delta \nu = \frac{\Delta W}{h} \geq \frac{1}{\Delta t}. \quad (10)$$

Таким образом, значения  $|p|$ , которые входят в спектральное разложение волны  $\Psi$ , занимают область:

$$\Delta |p| \geq \frac{\Delta W}{c} \geq \frac{h}{c \Delta t}. \quad (11)$$

Отсюда мы делаем вывод, что наблюдение или опыт в течение  $\Delta t$  не может привести к определению количества движения с неопределенностью меньшей  $\frac{h}{c \Delta t}$ . Это дает соотношение неопределенности нового характера.

Неравенство (11) можно найти еще иным способом. Если наблюдатель, поместившись в некоторой точке пространства, хочет ограничить длину волнового потока  $\Psi$ , он должен заставить его пройти сквозь отверстие, сделанное в экране и могущее закрываться при помощи ставня. Он будет поднимать ставень в течение интервала времени  $\Delta t$ , затем возвращать его на место таким образом, чтобы ограничить волновой поток, проходящий через экран в течение этого времени  $\Delta t$ . Но передняя часть этого волнового потока не может двигаться со скоростью большей  $c$ , и длина волнового потока, прошедшая через экран, максимум равна  $c \Delta t$ . Таким образом, беря ось  $z$  в направлении распространения, неопределенность координаты  $z$  частицы в пропущенной через экран волне будет:

$$\Delta z \leq c \Delta t \quad (12)$$

и, согласно соотношению Гайзенберга:

$$\Delta p_z \geq \frac{h}{\Delta z} \geq \frac{h}{c \Delta t}, \quad (13)$$

а так как здесь можно отождествить  $p$  и  $p_z$ , мы находим неравенство (11).

С первого взгляда может показаться, что соотношение (11) находится в противоречии с обозначением плоской монохроматической волны, ибо для нее мы имеем  $\Delta p = 0$ . Но это возражение можно устранить, заметив, что для того, чтобы быть в праве связывать с частицей плоскую монохроматическую волну  $\Psi$ , следовало бы иметь возможность утверждать, что частица может находиться в какой угодно точке пространства, а это утверждение могло бы оправдаться только для опыта

бесконечной продолжительности, поскольку никакое средство исследования не может пройти пространство со скоростью большей  $c$ . Остается однако возражение, что, строго говоря, наблюдатель никогда не может представить своих сведений о состоянии электрона при помощи безграничной плоской монохроматической волны.

Некоторые рассуждения приводят к мысли, что для тела собственной массы  $m_0$  измерение длины меньше  $\frac{h}{m_0 c}$  или продолжительности меньше  $\frac{h}{m_0 c^2}$  является иллюзорным<sup>1)</sup>. Это позволяет надеяться, что, если из теории электронов удастся исключить рассмотрение расстояний меньших  $\frac{h}{m_0 c}$  и интервалов времени меньших  $\frac{h}{m_0 c^2}$ , как лишенных смысла, может быть, тем самым удастся устранить трудность отрицательных энергий, но это пока еще не больше, чем надежда.

---

<sup>1)</sup> См. Шредингер, *Annales de l'Institut H. Poincaré*, loc. cit

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	3
-----------------------	---

### ЧАСТЬ ПЕРВАЯ

#### Успехи и неудачи квантовой теории и волновой механики в ее первоначальной форме

##### Глава I

#### Атомный спектр водорода. Теория Бора и Зоммерфельда

1. Формула Бальмера и спектральные термы водорода . . . . .	7
2. Теория Бора для спектральных термов водорода . . . . .	8
3. Квантованные энергии эллиптических орбит . . . . .	11
4. Теория тонкой структуры Зоммерфельда . . . . .	13

##### Глава II

#### Общие понятия о дублетных оптических спектрах и их интерпретация

1. Формула Ридберга и спектральные серии . . . . .	18
2. Дублетный спектр щелочных металлов . . . . .	19
3. Объяснение схемы Ридберг-Ритца при помощи теории Бора . . . . .	20
4. Дублетные спектры и квантовое число $j$ . . . . .	22

##### Глава III

#### Спектры X-лучей и теории Бора и Зоммерфельда

1. Закон Мозели и теория Бора . . . . .	24
2. Общий анализ X-спектров . . . . .	27
3. Классификация спектральных термов X-лучей . . . . .	29
4. Теоретическое толкование. Формула тонкой структуры Зоммерфельда . . . . .	31
5. Недостаточность теории тонкой структуры Зоммерфельда . . . . .	32
6. Распределение электронов по уровням. Правило Стонера . . . . .	35

##### Глава IV

#### Магнитные аномалии и гипотеза вращающегося электрона

1. Жиромгнитные аномалии . . . . .	36
2. Нормальный эффект Зеемана . . . . .	38
3. Аномалии эффекта Зеемана. Множитель Ланде . . . . .	40
4. Гипотеза вращающегося магнитного электрона . . . . .	43

##### Глава V

#### Краткое изложение принципов волновой механики

1. Точка зрения новой механики . . . . .	47
2. Нахождение нерелятивистского волнового уравнения . . . . .	48
3. Новая концепция механических величин частицы . . . . .	49



4. Собственные значения и собственные функции эрмитового оператора . . . . .	51
5. Основные принципы волновой механики . . . . .	54
6. Величины, одновременно и неодновременно измеримые . . . . .	57

## Глава VI

### Краткое изложение принципов волновой механики

(продолжение)

1. Некоторые сведения об алгебраических матрицах . . . . .	59
2. Матрицы волновой механики . . . . .	61
3. Средние значения в волновой механике . . . . .	63
4. Среднее значение координаты. Теорема Эренфеста . . . . .	64
5. Первые интегралы в волновой механике . . . . .	67

## Глава VII

### Релятивистская форма волновой механики с одной волновой функцией

1. Несколько формул из релятивистской механики . . . . .	69
2. Релятивистская волновая механика . . . . .	71
3. Плотность и поток вероятности, соответствующие уравнению (17) . . . . .	73

## Глава VIII

### Успехи и неудачи волновой механики с одной волновой функцией

1. Вычисление квантованной энергии. Пример водородного атома . . . . .	76
2. Тонкая структура и релятивистская волновая механика . . . . .	79
3. Волновая механика с одной волновой функцией и эффект Зеемана . . . . .	83
4. „Правила отбора“ в волновой механике . . . . .	87

## ЧАСТЬ ВТОРАЯ

### Теория вращающегося магнитного электрона Дирака Общие принципы

## Глава IX

### Теория Паули

1. Вращение электрона и поляризация света . . . . .	90
2. Теория Паули . . . . .	91
3. Пример применения предыдущей теории . . . . .	95
4. Недостаточность теории Паули . . . . .	98

## Глава X

### Теория Дирака

1. Обзор прежних результатов . . . . .	100
2. Критические замечания Дирака в отношении уравнений (4)--(8) . . . . .	101
3. Уравнение Дирака в отсутствие поля . . . . .	103
4. Уравнения Дирака в электромагнитном поле . . . . .	107

## Глава XI

### Релятивистская инвариантность уравнений Дирака

1. Инвариантность уравнений Дирака относительно преобразования Лоренца . . . . .	110
2. Более строгое доказательство релятивистской инвариантности . . . . .	113
3. Электромагнитная инвариантность уравнений Дирака . . . . .	117

## Плотность и ток в теории Дирака. Плоские волны

1. Выражения для плотности и потока вероятности . . . . .	119
2. Векторный характер плотности и тока . . . . .	121
3. Плоская волна в отсутствии поля . . . . .	123
4. Плотность и ток в плоской волне . . . . .	125

## Глава XIII

## Собственный магнетизм электрона

1. „Пакет вероятности“ в волновой механике . . . . .	127
2. Сферический пакет вероятности в теории Дирака . . . . .	129
3. Доказательство одной из формул электродинамики . . . . .	132
4. Интерпретация формул (14) . . . . .	135

## Глава XIV

## Тензор „плотность электрического и магнитного момента“

1. Магнитный момент электрона Дирака в ньютоновом приближении . . . . .	138
2. Средний магнитный момент плоской волны в ньютоновом приближении . . . . .	139
3. Тензор „плотность магнитного и электрического момента“ . . . . .	142
4. Простой пример: плоская монохроматическая волна . . . . .	146

## Глава XV

Матрицы и первые интегралы в теории Дирака.  
Собственный момент вращения электрона

1. Собственные значения и функции уравнений Дирака . . . . .	148
2. Матрицы и первые интегралы в теории Дирака . . . . .	151
3. Примеры первых интегралов. Собственный момент вращения электрона . . . . .	154
4. Явное определение $N_z$ Знак собственной массы для волн $\Psi_k$ . . . . .	157

## Глава XVI

## Систематическое резюме полученных результатов

1. Индекс функций $\Psi_k$ , рассматриваемый как переменная . . . . .	160
2. Выражение общих принципов в теории Дирака . . . . .	162
3. Пример: собственные значения и функции оператора $m_z$ . . . . .	164
4. 16 основных операторов теории Дирака. Соответствующие величины и плотности . . . . .	166
5. Замечания о векторе $\vec{\sigma}$ . . . . .	169
6. Замечания об инвариантности $\Omega_1$ и операторе $m_0 a_4$ . . . . .	171

## ЧАСТЬ ТРЕТЬЯ

Применение теории Дирака. Критические замечания  
и различные дополнения

## Глава XVII

## Объяснение тонкой структуры при помощи теории Дирака

1. Волновые уравнения для движения электрона в центральном поле . . . . .	176
2. Количество решений, соответствующее данному значению $n$ и $l$ ; момент вращения электрона в стационарных состояниях . . . . .	181
3. Вычисление уровней энергии для атома водорода . . . . .	183
4. Применение полученных результатов к рентгеновским спектрам . . . . .	188
5. Число электронов по уровням: правило Стовера . . . . .	190
6. Правила отбора в свете теории Дирака . . . . .	191

237

Глава XVIII  
Вывод формулы Ланде

1. Общий обзор теории возмущений . . . . .	194
2. Применение формулы (12) в случае эффекта Зеемана . . . . .	196
3. Развитие вычисления . . . . .	198
4. Резюме. Замечания . . . . .	203

Глава XIX  
Собственный и орбитальный момент.  
Поляризация электронных волн

1. Невозможность отделить собственный магнитный момент от орбитального магнитного момента (Бор) . . . . .	205
2. Невозможность измерить собственный момент вращения . . . . .	207
3. Более общая теория . . . . .	209
4. Поляризация электронных волн . . . . .	210

Глава XX  
Состояния с отрицательной энергией в теории Дирака

1. Плоская волна с отрицательной энергией . . . . .	212
2. Неполный характер системы волн с положительной энергией . . . . .	215
3. Парадокс Клейна . . . . .	218
4. Замечания и выводы . . . . .	220

Глава XXI  
„Дрожание“ Шредингера

1. Движение центра тяжести вероятности . . . . .	222
2. Теорема Эренфеста в теории Дирака уже неточна . . . . .	224
3. „Дрожание“ Шредингера . . . . .	225

Глава XXII  
Несколько замечаний о теории относительности  
и новой механике

1. Отсутствие в новой механике симметрии между пространством и временем . . . . .	229
2. Четвертое соотношение неопределенности . . . . .	230
3. Возможно ли в новой механике восстановить симметрию между пространством и временем? . . . . .	231
4. Более строгая форма соотношений неопределенности (Бор, Ландау и Пайерлс). . . . .	233

ОПЕЧАТКИ\*

Стр.	Строка	Напечатано	Должен быть
66	7 св.	$= \frac{h}{4\pi im}$	$= \frac{h}{2\pi im}$
96	13 сн.	$\mu_0 [(H_X - i H_Y) \Phi_1$	$\mu_0 [(H_X + i H_Y) \Phi_1$
96	3 сн.	$\frac{H - H_Z}{H_{X^2} + H_{Y^2}} (H_X - i H_Y)$	$\frac{H - H_Z}{H_{X^2} + H_{Y^2}} (H_X + i H_Y)$
97	10-11 св.	$H + H_X$	$H + H_Z$
101	8 св.	$P_4 = - \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$	$P_4 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$
147	5 св.	$J_y = -x$	$J_y = -I_x$
152	1 сн.	$= \frac{h}{2\pi i}$	$= \frac{h}{2\pi i}$
171	9 св.	$= \sum_1^4 \frac{\partial \sigma}{\partial x}$	$= \sum_1^4 \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_i}$

\* По вине переводчика — 4 и по вине типографии — 4.

Цена 4 руб 35 коп.

Ц. переплет 60 коп.

41-5-4



24835

