

СВЯЗЬ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ С КЛАССИЧЕСКОЙ.

Д. Иваненко и Л. Ландау.

Задачей настоящей работы является получение возможно более естественным путем уравнения Шрёдингера и его основных свойств. К волновой механике можно, в виду отсутствия модели, с еще большим правом, чем к теории Максвелла применить слова Герца «Теория Шрёдингера это уравнение Шрёдингера». Поэтому от рационального вывода последнего можно требовать наибольшей эвристической силы как в смысле общности, так и в смысле возможности дальнейшего обобщения.

§ 1. Известно, что отклонения от обычной Гамильтоновой механики становятся заметными только на весьма малых размерах (порядка размеров атома); в этом естественно усмотреть аналогию с отношением явлений диффракции к геометрической оптике. Между обеими группами явлений можно установить полное соответствие. Лучам геометрической оптики сопоставляются траектории механики. Можно построить систему «волновой» механики, находящуюся в таком же отношении с обычной, как волновая оптика с геометрической, что и было впервые сделано Шрёдингером.

Для установления соответствия, необходимо прежде всего найти механический аналог фазы. Обращение к вариационным принципам указывает, что роль последней играет величина пропорциональная действию (принцип Ферма для фазы $\delta \int d\varphi = 0$ и принцип Гамильтона для действия $\delta \int dW = 0$). Таким образом, можно написать:

$$W = h\varphi \dots \dots \dots (1)$$

где h — некоторая универсальная постоянная, имеющая размер действия (фаза величина нулевой размерности); она оказывается равной постоянной Планка, деленной на 2π . Впервые на возможность построения волновой механики и на связь действия с фазой указал Л. де-Бройль.¹

Произведем предельный переход. Для этого введем волновую функцию

$$\psi = ae^{i\varphi} = ae^{i\frac{W}{h}} \dots \dots \dots (2)$$

¹ L. de Broglie. Ann. d. Phys. (10), 3, 22 (1925).

За исходный пункт возьмем основное уравнение для W — уравнение Гамильтона-Якоби.¹ Как предельное по отношению к волновой механике, оно будет тем точнее, чем меньше «длина волны», т.-е. чем сильнее фаза меняется с изменением координат или чем меньше h в сравнении с интересующими нас размерами (подобным же образом релятивистская механика переходит в классическую при подстановке $c \rightarrow \infty$). Таким образом, нашей задачей является нахождение линейного («волнового») уравнения, при стремлении h к нулю переходящего в уравнение Гамильтона-Якоби. Для этого нам придется вычислять различные степени производных W по координатам и времени. Дифференцирование (2) дает:²

$$\frac{\partial \psi}{\partial q} = \frac{i}{h} \frac{\partial W}{\partial q} a e^{\frac{iW}{h}} + \frac{\partial a}{\partial q} e^{\frac{iW}{h}}$$

или при $h \rightarrow 0$

$$\frac{\partial \psi}{\partial q} = \frac{i}{h} \frac{\partial W}{\partial q} \psi; \dots \dots \dots (3)$$

оставляя и при вычислении дальнейших производных только главные члены относительно h получим:

$$\frac{\partial^n \psi}{\partial q^n} = \left(\frac{i}{h} \frac{\partial W}{\partial q} \right)^n \psi; \quad \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^n \psi = \left(\frac{h}{i} \right)^n \frac{\partial^n \psi}{\partial q^n}$$

или, символически,

$$\left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^n = \left(\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right)^n \dots \dots \dots (4)$$

В виду предположенной линейности окончательного уравнения, степени $\frac{\partial W}{\partial q}$ должны вычисляться из (4), а не из (3). Таким образом мы можем для получения уравнения Шрёдингера заменить в уравнении Г.-Я. каждую производную W по q (координате или времени) на оператор $\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ и символически умножить на ψ . Моменту $p = \frac{\partial W}{\partial q}$ очевидно сопоставляется оператор

$$\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial q},$$

а энергии

$$E = - \frac{\partial W}{\partial t} \text{ оператор } - \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial t} \dots \dots \dots (4a)$$

Мы видим, что предельный переход приводит к изящному методу операторов, предложенному Шрёдингером.³ В случае Гамильтоновой функции $H(q, p)$ и соответствующего уравнения Г.-Я. $\frac{\partial W}{\partial t} + H(q, \frac{\partial W}{\partial q}) = 0$ мы по предыдущему напишем уравнение Шрёдингера в виде:

$$\frac{h}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + [H \psi] = 0 \dots \dots \dots (5)$$

¹ В дальнейшем для краткости Г.-Я.

² D. Iwanenko u. L. Landau. ZS f. Phys. 40, 161 (1926).

³ E. Schrödinger. Ann. d. Phys. 79 (1926).

где [] — знак символического умножения оператора H на ψ . Если

$$H = \sum_k \frac{1}{2m_k} p_k^2 + V$$

(p_k — вектор момента для точки с номером k , V не зависит от моментов и суммирование производится по всем точкам), то вместо (5) имеем:

$$\sum_k \frac{1}{2m_k} \Delta_k \psi + \frac{i}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{1}{h^2} V \psi = 0 \quad (6)$$

где Δ_k — оператор Лапласа, по координатам k -той точки.

При употреблении криволинейных координат нужно взять соответственные выражения для Δ .

Перейдем к выводу релятивистского уравнения Шрёдингера. Будем исходить из выражения для действия

$$iW = -mc ds + e\varphi_k dx^k, \quad (7)$$

где m — масса, e — заряд частицы, φ_k — потенциал внешнего поля, $ds^2 = g_{kl} dx^k dx^l$ — квадрат элемента длины и суммирование по всем четырем значкам подразумевается.

Имеем:

$$dW = \frac{\partial W}{\partial x^k} dx^k = -mc \frac{g_{kl} dx^k dx^l}{ds} + e\varphi_k dx^k \quad (8a)$$

$$\frac{\partial W}{\partial x^k} = -mc g_{kl} \frac{dx^l}{ds} = e\varphi_k \quad (8b)$$

(мы могли «разделить» на dx^k , так как (8a) годно для любых dx^k). Или

$$\frac{\partial W}{\partial x^k} - e\varphi_k = -mc g_{kl} \frac{dx^l}{ds}, \quad g^{kl} \left(\frac{\partial W}{\partial x^k} - e\varphi_k \right) \left(\frac{\partial W}{\partial x^l} - e\varphi_l \right) = -m^2 c^2 \quad (9)$$

Применяя метод предельного перехода, мы получим, обозначая тензорные производные точками,

$$\psi_{;k}^k - 2e \frac{i}{h} \varphi^k \psi_k - \frac{1}{h^2} (m^2 c^2 + e^2 \varphi_k \varphi^k) \psi = 0 \quad (10a)$$

что можно переписать в виде

$$\frac{1}{V-g} \frac{\partial}{\partial x^l} \left(V-g g^{kl} \frac{\partial \psi}{\partial x^k} \right) - 2e \frac{i}{h} \varphi^k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} - \frac{1}{h^2} (m^2 c^2 + e^2 \varphi_k \varphi^k) \psi = 0 \quad (10b)$$

для плоского мира

$$\Delta \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - 2 \frac{i}{h} e \left(\frac{\varphi}{c^2} \frac{\partial W}{\partial t} + \mathfrak{A} \text{grad} \psi \right) - \frac{1}{h^2} \left\{ m^2 c^2 + \frac{e^2}{c^2} (\mathfrak{A}^2 - \varphi^2) \right\} \psi = 0$$

(10c), где φ скалярный и \mathfrak{A} векторпотенциал. Это уравнение было впервые получено Клейном² и Фоком³ с помощью пятой координаты.

¹ См. E. Schrödinger. Ann. d. Phys. 81, 132 (1926).

² O. Klein. ZS. f. Phys. 37, 895 (1926).

³ V. Fock. ZS. f. Phys. 39, 226 (1926).

Для нахождения связи между уравнениями (10с) и (5) воспользуемся формулой для действия (7) и соотношением

$$ds^2 = c^2 dt^2 - (dx^2 + dy^2 + dz^2) = c^2 dt^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \quad (v \text{ — скорость}).$$

Формула (7) переписывается:

$$dW = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} dt + e\varphi_k dx^k \quad \text{или при } c \rightarrow \infty$$

$$dW = -mc^2 dt + dW' \dots \dots \dots (11a)$$

где dW' остается конечным и переходит в $L dt$, где L Лагранжева функция классической механики ($L = \frac{mv^2}{2} + \dots$). Интегрируя (11a) получаем окончательно

$$W' = \lim_{c \rightarrow \infty} (W + mc^2 t) \dots \dots \dots (11b)$$

и в виду (2)

$$\psi' = \lim_{c \rightarrow \infty} \psi e^{\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \dots \dots \dots (11c)^1$$

Подставляя (11b) в уравнение (10с) и переходя к пределу $c \rightarrow \infty$, мы для ψ' получим действительно уравнение типа (5).

Область применения уравнения (10) ограничена уже выбором величины действия (7), при получении которого из электромагнитного действия делаются различные пренебрежения. Поэтому, в частности, затухание не может быть получено из уравнения (10).

Что касается вывода уравнения (10) с пятой координатой, то заметим, что он носит случайный характер: выбор метрики, к тому же зависящей от заряда и массы частицы (электрона? протона?), произволен, так же как исключение потенциала самой частицы из φ_k . Вывод основного уравнения волновой механики, как простого волнового, вида $\Delta\psi - \frac{1}{u^2} \frac{d^2\psi}{dt^2} = 0$, не может считаться общим методом, так как этим путем можно получить только экспоненциальные решения ($\psi = \psi_0 e^{iat}$) уравнений (6) и (10), что имеет место только в случае консервативных систем.

§ 2. Перейдем к рассмотрению физического смысла уравнения Шрёдингера. Для этого обратимся к уравнению Г.-Я., служившему нам исходным пунктом. Пусть имеется физическая величина f (напр., q^2, q^3, p и т. д.). Нам необходимо характеризовать ее как функцию движения. Но всякий интеграл уравнения Г.-Я. сопоставляет каждой точке с координатами q^k момент $p_k = \frac{\partial W}{\partial q^k}$ и, следовательно, определенную «скорость». В этом смысле можно говорить о «жидкости», все точки которой двигаются по данному закону. Введем понятие о «плотности» жидкости ρ — пусть «количество точек»

¹ См. также V. Bursian. ZS. f. Phys. 40, 708 (1927).

в объеме $d\tau = dq^1 \dots dq^n$ будет $\rho d\tau$. Естественнее всего, очевидно, сопоставить величине f некоторое среднее значение

$$\bar{f} = \frac{\int f \rho d\tau}{\int \rho d\tau}, \dots \dots \dots (12)$$

где интеграл берется по всем значениям q^k , или полагая, без уменьшения общности, $\int \rho d\tau = 1$.

$$\bar{f} = \int f \rho d\tau \dots \dots \dots (13)$$

Таким образом для физической интерпретации уравнения Г.-Я. мы ввели в рассмотрение не одну, а бесконечное множество точек, движущихся по одному и тому же закону, следовательно, пришли к статистическому его пониманию. Изменение ρ со временем дается уравнением непрерывности для жидкости

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial q^k} (\rho \dot{q}^k) = 0 \dots \dots \dots (14)$$

где \dot{q}^k определяется из

$$\dot{q}^k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \text{ и } p_k = \frac{\partial W}{\partial q^k} \dots \dots \dots (14a)$$

Для истолкования уравнения Г.-Я. нам пришлось присоединить к нему уравнение (14) для ρ . Покажем, что уравнение Шрёдингера уже содержит в себе аналог последнего. Для этого произведем обратный переход. Например, подстановка $\psi = a e^{\frac{iW}{\hbar}}$ в уравнение (6) даст, если расположить члены по степеням $\left(\frac{\hbar}{i}\right)$:

$$a \left(\frac{\partial W}{\partial t} + \sum_k \frac{1}{2m_k} \overline{\text{grad}_k W^2} + \dot{V} \right) + \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial a}{\partial t} + \sum_k \frac{1}{m_k} \text{grad}_k a \text{grad}_k W + \right. \\ \left. + a \sum_k \frac{1}{2m_k} \Delta_k W \right) - \hbar^2 (\dots) = 0 \dots \dots \dots (15a)$$

Приравнявая нулю отдельно действительную и мнимую часть уравнения (15a), мы получим в первом приближении ($\hbar \rightarrow 0$) с одной стороны уравнение Г.-Я., а с другой стороны уравнение:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \sum_k \frac{1}{m_k} \text{grad}_k a \text{grad}_k W + a \sum_k \frac{1}{2m_k} \Delta_k W = 0, \dots \dots (15b)$$

которое при подстановке $a^2 = \rho$ (15c) переходит в уравнение (14). Таким образом величина $\psi\psi^* = a^2$ ¹ играет роль «плотности» ρ и $\psi\psi^* d\tau$ соответствует «вероятности» попадания точки в объем $d\tau$. Действительно:

$$\frac{\partial \psi\psi^*}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \psi^* \left(- \sum_k \frac{\hbar}{2im_k} \Delta_k \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi \right) + \psi \left(+ \sum_k \frac{\hbar}{2im_k} \Delta_k \psi^* - \frac{i}{\hbar} V \psi^* \right) \\ = - \sum_k \frac{\hbar}{2im_k} \text{div}_k (\psi^* \text{grad}_k \psi - \psi \text{grad}_k \psi^*) \dots \dots \dots (16)$$

¹ Звездочка при ψ означает комплексно-сопряженную величину.

т.е. $\psi\psi^*$ удовлетворяет уравнению «непрерывности» вида (14). Тот факт, что уравнение (15b) должно переходить в уравнение (14), показывает, что a и, следовательно, ψ имеют скалярный характер.

Мы видим, что уравнение Шрёдингера, как и уравнение Г.-Я. является результатом некоторого усреднения, смысл которого пока неясен. Все попытки перейти от описания множества одинаковых систем (средние!) к единичной модели следует признать неудавшимися.

Таким образом, функции координат f мы в волновой механике должны сопоставить

$$\bar{f} = \int f \psi \psi^* d\tau, \dots \dots \dots (17)$$

где ψ удовлетворяет условию

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1 \dots \dots \dots (18)$$

Продифференцируем обе части равенства (17) по времени

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{f}}{dt} &= \overline{v \text{grad} f} = \int f \frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) d\tau = - \int \frac{h}{2im} f \text{div} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) d\tau = \\ &= - \int \frac{h}{2im} \text{div} \{ (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) f \} d\tau + \int \frac{h}{2im} \text{grad} f (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) \end{aligned}$$

(19a).¹ Умножив (19) на m и обозначая $\text{grad} f$ через $\bar{\delta}$, мы получим, принимая во внимание теорему Гаусса:

$$\bar{\delta} \bar{f} = \int -\frac{h}{2i} \bar{\delta} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) d\tau, \dots \dots \dots (19b)$$

или, окончательно, для любой величины, линейно зависящей от моментов

$$\bar{F} = \int \frac{1}{2} \{ \psi^* [F\psi] - \psi [F\psi^*] \} d\tau \dots \dots \dots (19c)$$

Для энергии получим из (1a) и (19c)

$$\bar{E} = \int \frac{h}{2i} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\tau \dots \dots \dots (19d).$$

§ 3. В релятивистском случае мы, не производя предельного перехода, обратимся прямо к синтетическому методу.²

Умножим уравнение для ψ и ψ^* соответственно на ψ^* и ψ и вычтем второе из первого:

$$\left. \begin{aligned} \frac{h}{2} (\psi^* \psi_{,k} - \psi \psi^*_{,k}) - 2e\varphi^k (\psi^* \psi_{,k} + \psi \psi^*_{,k}) &= 0, \\ s_{,k} &= 0, \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (20)$$

где
$$s^k = \frac{h}{2i} (\psi^* \psi_{,k} - \psi \psi^*_{,k}) - e\varphi^k \psi \psi^*;$$

вводя тензорную плотность \bar{s}^k :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \bar{s}^k}{\partial x^k} &= 0 \\ \bar{s}^k &= \sqrt{-g} g^{kl} \left\{ \frac{h}{2i} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x^l} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x^l} \right) - e\varphi_l \psi \psi^* \right\}; \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (20a)$$

¹ Не нужно забывать, что слева f функция координат движущейся точки, а справа функция переменных интегрирования.

² См. также W. Gordon. ZS. f. Phys. 40, 117 (1926).

Из (20a) следует, что $\int \xi^k dS_k = \text{const}$, где интеграл берется по уходящей в бесконечность гиперповерхности S . Не уменьшая общности, положим:

$$\int \xi^k dS_k = 1 \dots \dots \dots (21)$$

По аналогии с (13) и (18) можно заключить, что величина $\xi^k dS_k$ есть «вероятность» для точки, находящейся на участке dS_k гиперповерхности S . Для любой функции координат f имеем:

$$\bar{f}_s = \int f \xi^k dS_k \dots \dots \dots (22)$$

Для средних в данный момент интегралы берутся по объему.

По (20a) $\frac{d\xi^\alpha}{dt} + \text{div} \xi^\alpha = 0$ ($\alpha = 1, 2, 3$) и скорость дается соотношением

$$\bar{v} = \int v^p d\tau = \int \xi^\alpha dx dy dz \dots \dots \dots (23)$$

«Средний» потенциал электромагнитного поля частицы, как было указано Гордоном¹, дается

$$\bar{\Phi}_k = \int \frac{[S_k]_{t-\frac{r}{c}}}{r} dx dy dz.$$

Метода получения ξ^k , предложенная Шрёдингером² (из вариационного принципа), не заслуживает доверия, так как вариация производится одновременно по двум потенциалам (внешнего или полного потенциала).

§ 4. Обратимся к случаю консервативных систем. Легко показать, что общий интеграл будет иметь вид:

$$\Psi = \sum_n a_n \chi_n e^{i\varepsilon_n t}, \dots \dots \dots (24)$$

где χ_n не зависят от времени и a_n произвольные постоянные. Для уравнения (6) χ_n удовлетворяют соотношению:

$$\Delta \chi_n - \frac{2m}{h} (\varepsilon_n + \frac{1}{h} V) \chi_n = 0.$$

Как известно, ε_n (характеристические числа) могут составлять как дискретный, так и непрерывный ряд значений; χ_n удовлетворяют условиям ортогональности

$$\int \chi_n \chi_m^* d\tau = 0 \dots \dots \dots (25)$$

Нормируя χ_n так, чтобы $\int \chi_n \chi_n^* d\tau = \int |\chi_n|^2 d\tau = 1$, мы получим из условия (18)

$$\int \psi \psi^* d\tau = \sum_n |a_n|^2 = 1 \dots \dots \dots (26)$$

¹ W. Gordon, l. c.

² E. Schrödinger. Ann. d. Phys. 82, 265 (1927).

Для любой величины f имеем из (17) и (19с)

$$\bar{f} = \sum_n \sum_m a_n a_m^* f_{nm} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t}, \dots \dots \dots (27)$$

где f_{nm} — независящие от времени константы. Матрицы f_{nm} были впервые введены Гейзенбергом. Для энергии получим из (19d)

$$E = - \sum_k |a_n|^2 h\varepsilon_n = \sum_n |a_n|^2 E_n, \dots \dots \dots (27a).$$

где $E_n = -h\varepsilon_n$.

Излучение дается, как известно, второй производной вектора поляризации:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathfrak{P}} &= \frac{d^2}{dt^2} \mathfrak{P} = \frac{d^2}{dt^2} \sum_n \sum_m a_n a_m^* \mathfrak{P}_{nm} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} = \\ &= - \sum_n \sum_m a_n a_m^* (\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2 \mathfrak{P}_{nm} e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} \dots \dots \dots (28) \end{aligned}$$

Таким образом, амплитуда, фаза и поляризация линии частоты

$$2\pi \nu_{nm} = \omega_{nm} = \varepsilon_n - \varepsilon_m$$

определится вектором $-a_n a_m^* \omega_{nm}^2 \mathfrak{P}_{nm}$ и для данной линии, зависит от состояния системы атомов (числа a_n).

Мы видим, что волновая механика, как для получения результатов, так и для их интерпретации, не нуждается в введении стационарных состояний. Пользование моделью Бора не дает ничего нового, любой результат, толкуемый Борном¹ в ее пользу, может быть получен из волновой механики совершенно независимо от всяких дополнительных частных предположений.

§ 5. Видя в теории Шрёдингера результат некоторого усреднения, мы должны вводить статистику уже в самое ψ . В простом случае консервативных систем ряд соображений (в том числе и предельный переход) показывают, что нужно положить:

$$|a_n|^2 : |a_m|^2 = e^{-\frac{E_n}{kT}} : e^{-\frac{E_m}{kT}} \dots \dots \dots (29)$$

Это выражение, как легко показать, приводит к статистике Планка.

¹ M. Born, ZS. f. Phys. 38, 803 (1926).

² D. Iwanenko und L. Landau. ZS. f. Phys. 42, 562 (1927).