

СЕМИНАР  
ПО ИЗБРАННЫМ ВОПРОСАМ ОПТИКИ

(1934—1935 гг.)

О СВЯЗИ КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ДИСПЕРСИИ

(14 VI 1935 г.)<sup>1</sup>

Я хочу остановиться на вещах, которые не прямо примыкают к тем вопросам, которые разбирались на семинаре, но о которых, по-моему, все же следует поговорить. Речь идет об одном вопросе, касающемся связи квантовой и классической теории прохождения света через тела. Безусловно, базой современной физики является классика, но, с другой стороны, кванты, — по-видимому, единственный правильный путь для глубокого понимания микрокосмоса. Мы возьмем прохождение света через прозрачные тела — это большой круг проблем, охватывающий дисперсию в узком смысле, керр-эффект, магнитное вращение плоскости поляризации и т. д., — и на нем выясним, как далеко простирается сходство, в чем заключаются различия, — одним словом, какова связь классической и квантовой трактовки вопроса.

В классике исходными являются основные максвелл-лоренцовы уравнения

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{H}}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} (\dot{\mathbf{E}} + 4\pi\rho\mathbf{v}). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Но их недостаточно для решения вопроса, нам надо знать еще связь  $\mathbf{v}$  с полем. Мы ограничимся случаем газа, когда можно пренебречь взаимодействием частиц. Рассматривая среду как непрерывную, мы должны все величины в (1) считать *средними* значениями, так что

$$\rho\mathbf{v} = Ne \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\mathbf{P}}{dt},$$

<sup>1</sup> [Лекция, прочитанная на семинаре по избранным вопросам оптики. Обработка С. М. Рытова по запискам С. М. Рытова и М. А. Леонтовича.]

где  $\mathbf{P}$  — поляризация. Таким образом, все сводится к отысканию  $\mathbf{P}$  как функции поля или в конечном счете среднего отклонения  $\mathbf{g}$ .

Мы находим связь  $\mathbf{g}$  с полем из законов классической механики, применяемых к электрону в атоме или молекуле, причем вся классическая теория исходит из предположения упругой связи электрона. Таким образом, уравнение движения электрона есть

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + k\mathbf{r} = e\mathbf{E}. \quad (2)$$

Это второй этап решения задачи — механические уравнения. Из них мы получаем  $\mathbf{g} = \alpha \mathbf{E}$ , и дальнейший путь ясен; он дает нам для квадрата показателя преломления

$$n^2 = 1 + 4\pi N e \alpha.$$

Поскольку  $\alpha = \alpha(\omega)$ , постольку мы получаем объяснение дисперсии, аномальной дисперсии и т. д.

В изложенном виде теория не учитывает случая резонанса ( $\omega = \omega_0$ ). Чтобы охватить и этот случай, надо дополнить уравнение (2) затуханием, я сказал бы «принципиальным» затуханием, ибо по классике колеблющийся электрон обязательно излучает. Это совершенно общее положение, и ни при каких условиях оно не может быть устранено. Другие причины затухания могут быть, а могут и отсутствовать, но затухание благодаря излучению есть всегда. Конечно, вдали от резонанса им можно пренебречь.

Более сложный случай — прохождение света при наличии внешнего магнитного поля  $\mathfrak{H}$ . Тогда вместо (2) мы будем иметь уравнение

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + k\mathbf{r} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\dot{\mathbf{r}}, \mathfrak{H}]^1. \quad (3)$$

Задача становится сложнее, но в общем все остается по-прежнему.

Как же ставится вопрос в квантовой механике? Здесь нельзя не отметить большого преимущества классики. У Лоренца подкупает исчерпывающая полнота трактовки и простота. Конечно, модель неверна и ее усложнение дела не спасает. В этом мы убедились: кванты отсюда и возникли. Но система принципов классической теории чрезвычайно последовательна и полна. Квантовая теория далеко не так стройна, и именно в дисперсии это особенно хорошо видно, поскольку в настоящее время у нас нет настоящей

<sup>1</sup> Конечно, действием на электрон магнитного поля  $\mathbf{H}$  самой волны мы пренебрегаем: оно имеет порядок  $\frac{v}{c}$  по отношению к действию электрического поля  $\mathbf{E}$ .

квантовой теории поля (механика есть, и вполне удовлетворительная).

Современная квантовая теория дисперсии в первом приближении поступает так. Она *перенимает* уравнения поля (1) без всяких изменений из классики, а уравнение движения (2) заменяется волновой механикой. Конечно, это *непоследовательно*, это компромисс, но все же он дал уже много ценных результатов. На этой, пожалуй, пока что единственной стадии мы и остановимся.

Мы не будем сегодня говорить о том, почему вообще пришлось отказаться от классических уравнений движения. Самое существенное здесь не в отказе от классики, а в отказе от *модели* осциллятора. Мы знаем, что в атоме водорода хорошие результаты дает не упругая сила, а кулонов закон (это и в классике дает другие результаты). Вообще увидели, что квазиупругая модель не годна. Но, превосходящая результат, я укажу теперь же: если работать с квазиупругим осциллятором, то в интересующих нас вопросах и классика и кванты дают *принципиально* (а не почти) *одно и то же*.

В волновой механике движение электрона определяется уравнением Шрёдингера. Этого мало — дело не в изменении уравнения, а в том, что весь подход совершенно другой. Волновая механика отказывается от разговоров о движении индивидуальной точки и имеет дело с функциями распределения, с вероятностями. В данном опыте, который я называю движением точки под действием данной силы, я имею  $\Phi(x) dx$  — вероятность найти частицу в интервале  $(x, x + dx)$ . Если при «совершенно тех же самых» условиях повторить опыт, то классика говорит, что и результаты получатся прежние. Волновая механика утверждает, что это не так. При повторении опыта, как бы точно мы его ни повторяли, мы всегда придем только к *вероятности*  $\Phi(x) dx$ . И уравнение Шрёдингера относится не к  $x$ , как в классике, а к этой вероятностной функции. Для случая одной степени свободы Шрёдингер пишет <sup>1</sup>

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (4)$$

где  $V(x)$  — потенциальная энергия, как она выражается в классике; например, для осциллятора  $V(x) = \frac{kx^2}{2}$ . «Рецепт» следующий: зная  $\psi(x, 0)$  при  $t = 0$ , мы решаем (4) и находим  $\psi(x, t)$ . Искомая вероятность будет

$$\Phi(x, t) = \psi(x, t) \psi^*(x, t).$$

Таково изменение распределений со временем.

<sup>1</sup> Здесь  $\hbar$  — плашковская постоянная, деленная на  $2\pi$ .

Естественно напрашиваются следующие вопросы:

а) как пришли к уравнению (4), как его «вывели»?

б) как писать это уравнение в различных случаях?

Ответ на второй вопрос чрезвычайно прост: берите классическую гамильтонову функцию [для одной степени свободы это  $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ ] и заменяйте в ней  $p$  и  $x$  операторами:  $x \rightarrow x$ ,  $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ; тогда получится уравнение Шрёдингера

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (5)$$

Что касается первого вопроса, т. е. вопроса о том, откуда же взять изложенный рецепт, то надо сказать прямо: *вывода* здесь нет и не может быть. Вывести — это значит получить логическим путем из других законов. Поэтому новые вещи *не выводятся*. Уравнение Шрёдингера *угадано*. Все величие и вся мощь нового аппарата — в его разрыве с классикой. Волновая механика утверждает, что законы микромира принципиально отличны от классических и поэтому их нельзя вывести из классики. Классические законы в микромире просто неверны, и при переходе к новым законам логический скачок должен быть. И он есть. Конечно, можно сказать, что мы не удовлетворены сухим *рецептом*. Эту неудовлетворенность можно устранить, проследив, как *пришли* исторически к (4), но именно как пришли, а не вывели.

Сейчас нам кажется невероятным, как могли долгое время думать, что внутри атомов верны классические уравнения движения. Это, конечно, предрассудок. Классические уравнения взяты из макроскопического опыта, уравнения (2) припасованы к движениям больших тел, больших масс. Отсюда очень далеко до гипотезы, что они же справедливы и в микромире. Это убеждение — предрассудок. Но другое должно иметь место: новые уравнения при переходе к макроскопическим телам должны давать классические уравнения. Этого мы вправе от них требовать, и это требование играло роль при их установлении. Однако простая связь квантов и классики была найдена не попутно с установлением новых уравнений, а лишь впоследствии. В особенно простой форме это сделал Эренфест.

Конечно, и с рецептом дело обстоит сложнее. Мы рассмотрели только координату, но состояние однозначно определено только тогда, когда мы знаем еще и скорость или импульс. Значит, наряду с распределением в пространстве надо еще уметь сказать, что дает  $\psi$  для распределения по импульсам, для определения вероятности  $G(p) dp$  того, что импульс лежит в интервале  $(p, p + dp)$ . Ответ — вполне определенный и очень общий, но я остановлюсь на этом

коротко, так как сегодня нам это не понадобится. Если мы имеем какой-либо оператор  $L$ , то, как известно, его собственными значениями называются те значения параметра  $\lambda$ , при которых уравнение

$$L\varphi = \lambda\varphi$$

имеет решения (эти решения — собственные функции). Для импульса

$$-i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial x} = p\varphi, \text{ откуда } \varphi = \text{const} \cdot e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Рецепт отыскания  $G(p)$  таков: найдите собственные функции интересующей нас величины ( $p$ ), разложите  $\psi$  в ряд (интеграл) по этим собственным функциям  $\varphi$ , и тогда квадраты модулей коэффициентов разложения и будут  $G(p)$ , соответствующие найденным значениям  $p$ .

Итак, и  $\Phi(x)$  и  $G(p)$  получаются с помощью одной и той же функции  $\psi$ , и это влечет за собой наличие связи между ними. Правда, эта связь, получающаяся чисто математически, еще очень широка, но все же она есть, и это — *принципиальное отличие от классики*. Физически нам важно  $\psi\psi^*$ , но всякое  $\psi$ , умноженное на  $e^{if(x)}$ , даст, очевидно, то же самое  $\Phi(x)$ . Разложение же  $\psi$  по  $\varphi$  будет различно, и  $G(p)$  получится иным для  $\psi$  и для  $\psi e^{if(x)}$ . Таким образом,  $\Phi$  и  $G$  связаны, хотя и не очень крепко, но связаны: чем уже  $\Phi$ , тем шире  $G$ , и наоборот. Количественные оценки ширины обоих распределений соотносятся так, что

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar. \quad (6)$$

Это знаменитое соотношение неопределенностей Гейзенберга. То, что классические  $x$  и  $p$  представляют собой предельные случаи распределений  $\Phi$  и  $G$ , было бы тривиально, если бы не соотношение (6). Оно утверждает, что предельно острые распределения  $\Phi$  и  $G$  одновременно невозможны.

Вернемся к проблеме дисперсии. Как мы совместим теперь (1) и (4)? В классике надо было найти  $r$  в зависимости от  $E$  в каждой точке, причем мы считали — и это, конечно, остается в силе и в квантах, — что в пределах атома, в силу его малости,  $E$  не меняется от точки к точке. Между тем в уравнении (4), в отличие от классического уравнения (2), вообще нет понятия об  $r$  в данной точке. Согласно волновой механике, под  $r$  надо понимать *статистическое среднее*.

Вообще средним значением называется математическое ожидание

$$\bar{x} = \sum xW(x),$$

или в нашем случае

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi \psi^* dx. \quad (7)$$

(7) можно найти для каждого электрона, и мы получим тогда интересующую нас зависимость:  $\bar{x}$  как функцию  $t$ , но не  $x$ . Квантовая теория дисперсии постулирует, что надо найти связь  $\bar{x}$  с  $E$  и ее подставить в (1). Мы и здесь получим, что  $\bar{x}$  пропорционален  $E$ , и коэффициент пропорциональности войдет в показатель преломления уже известным образом.

Почему в  $\bar{x}$  войдет  $E$ ? Потому, что в (4) теперь, при наличии поля волны, войдет в качестве потенциальной энергии не внутренняя энергия  $V(x)$ , а

$$V(x) - eEx. \quad (8)$$

Надо решить теперь (4) с (8). Это не просто, и решение находят приближенно. И вот оказывается, что если проделать это для осциллятора, то в первом приближении нет никаких отличий от классики. Для кулонова поля отличия есть, в результаты входит  $\hbar$ , что сразу же указывает на недостижимость этих результатов классическим путем. Получаются новые эффекты (например, отрицательная дисперсия), но и в общем случае дисперсионные формулы очень похожи на классические: те же резонансные множители  $\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}$

и т. д. В деталях (конечно, важных деталях) есть отличия.

Итак, надо решать уравнение (4), проделать все выкладки, и в результате получится почти классический результат, а для осциллятора (по крайней мере в первом приближении) — в точности классический. Возникает вопрос: что для осциллятора совпадение случайно или принципиально?

Для совсем других целей Эренфест установил теорему, к которой мы теперь и перейдем. Вопрос заключается в следующем: можно ли как-нибудь просто и наглядно перейти от квантов к классике? Теорема Эренфеста говорит о том, как и когда это можно сделать. Возьмем (7), и посмотрим, какому уравнению удовлетворяет  $x$ . Ведь физически нас интересует именно  $\bar{x}$ , а вовсе не  $x$ ,  $\psi$  и т. д. Может быть,  $\bar{x}$  удовлетворяет более простому уравнению?

Перепишем (4) для  $\psi^*$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x) \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (4')$$

Умножим (4) на  $\psi^*$ , а (4') на  $-\psi$  и сложим. Получаем

$$\frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right).$$

Вычислим теперь  $\dot{\bar{x}}$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t} dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ x \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx. \end{aligned}$$

Все функции предполагаются такими, что в  $\pm\infty$  они достаточно быстро стремятся к нулю. Проинтегрированная часть поэтому пропадает, и мы получаем

$$\dot{\bar{x}} = - \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx.$$

Если таким же путем вычислить  $\ddot{\bar{x}}$ , то получается *замечательный* результат

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V}{\partial x} \psi \psi^* dx = - \frac{\partial \bar{V}}{\partial x}. \quad (9)$$

Таким образом, ускорение удовлетворяет простому уравнению, но это уравнение ничего не дает: чтобы вычислить интеграл, надо знать  $\psi$ , т. е. решить (4). Эренфест использовал (9) так: пусть  $\psi \psi^*$  — очень узкое распределение и на всем интервале  $\Delta x$ , где  $\psi \psi^*$  имеет заметную величину,  $\frac{\partial V}{\partial x}$  почти не меняется. Если ширина пакета  $\Delta x$  не меняется или достаточно мало меняется со временем, то в течение известного промежутка времени можно заменять (9) уравнением, в котором  $\frac{\partial V}{\partial x}$  вынесена из-под интеграла. Так как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \psi^* dx = 1, \text{ то}$$

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial x}, \quad (10)$$

т. е. ньютоново уравнение. Оно справедливо для больших тел, больших масс, когда расплывание пакета ничтожно. Таким образом, ньютонова механика есть предельный случай, причем  $\bar{x}$  — это ньютоново  $x$ .

Эренфест приводит следующие примеры:

1)  $m = 1$  г, ширина пакета  $\Delta x = 10^{-3}$  см. Ширина пакета удвоится через время  $T = 10^{21}$  сек. В течение этого времени можно пользоваться (10);

2)  $m = 10^{-12}$  г,  $\Delta x = 10^{-4}$  см (броуновская частица). И здесь еще  $T = 10^7$  сек;

3)  $m = 1,7 \cdot 10^{-24}$  г,  $\Delta x = 10^{-8}$  см (электрон в пределах атома),  $T = 10^{-13}$  сек. Отсюда ясно, что для электрона в атоме ни о каком применении классики не может быть и речи. Там  $\frac{\partial V}{\partial x}$  отнюдь нельзя считать постоянной всюду, где  $\psi\psi^* \neq 0$ . Значит, пользоваться теоремой Эренфеста для дисперсии преждевременно. (9) верно, но (10) нет, и мы опять стоим перед необходимостью проведения полного расчета.

Но возьмем осциллятор. Здесь потенциальная энергия будет  $\frac{kx^2}{2} - eEx$ , и, следовательно, (9) принимает вид

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -k \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi \psi^* dx + eE \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \psi^* dx,$$

т. е.

$$m \ddot{x} + kx = eE. \quad (11)$$

Значит, в этом частном случае для среднего значения совершенно строго верна классика со всеми вытекающими из (11) последствиями. Конечно, это связано со специальным видом  $V(x)$ : только для квадратичной и линейной форм и постоянной это так, причем то же самое справедливо и для пространственного и даже анизотропного осциллятора.

Как это ни просто, но это проясняет связь между классической и квантовой теорией дисперсии. Здесь имеются два различия — моделей и принципов. Так вот для модели осциллятора различие в принципах применительно к вопросам дисперсии несущественно (в других вопросах, как, например, запас энергии и т. д., разница есть).

При наличии магнитного поля  $\mathfrak{H}$  меняется сам вид уравнения Шрёдингера, ибо, как известно, в магнитном поле уже нельзя говорить о потенциальной энергии  $V(x)$ . Известно, однако, что и в этом случае можно подыскать обобщенную гамильтонову функцию, вводя в импульсы  $p$  векторный потенциал. Квантовики берут эту обобщенную классическую гамильтонову функцию и ее переводят на язык операторов. Это и дает обобщенное уравнение Шрёдингера. Вместо (9) тогда получается

$$m_s \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \nabla V \cdot \psi \psi^* d\tau - \frac{e}{c} [\mathbf{r}, \mathfrak{H}],$$

т. е. и здесь для осциллятора получается классическое уравнение движения.



Итак, в случае осциллятора все вопросы дисперсии получают в квантовой теории тот же ответ, что и в классике. Мы видим, что важны не кванты, а модель, и, к сожалению, не случайно, что это все получается только для осциллятора. Осциллятор — единственная система, где частота не зависит от амплитуды, а, грубо говоря, квантуется ведь именно амплитуда. Всюду, где частота зависит от амплитуды (нелинейные системы), неизбежно — и нельзя ожидать другого — классика и кванты не дадут одного и того же.

В заключение я хочу указать на то, что сведение к классике может иметь и более серьезное значение при исследовании принципиально новых вопросов, так как оно сильно все упрощает. Я укажу для примера на вопрос о запаздывании явления Фарадея, рассмотренный М. А. Дивильковским<sup>1</sup>, вопросы, касающиеся сдвига и уширения спектральных линий, наконец, вопросы излучения. У Дирака они рассмотрены приближенно и не строго — есть расходящиеся ряды и т. д. Я думаю, что это не от существа дела, как, например, в вопросе о бесконечной энергии, где проявляются недостатки теории, а от плохих методов приближения при вычислениях.

<sup>1</sup> [ЖЭТФ, 7, вып. 5, 650, 1937.]