

вена парамагнитной восприимчивости и т. д.), отметим только, что последующее развитие квантовой механики полностью подтвердило ее. Но даже если подвергнуть сомнению объяснение опыта, данное выше, тем не менее существование λ дискретных пятен на детектирующем экране нельзя понять, если не допустить, что некоторые величины, характеризующие внутренние движения в атоме, квантуются. Действительно, если движение центра масс следует законам классической механики, то траектория атома полностью определяется его динамическим состоянием на входе в область, где действует магнитное поле. Появление ряда дискретных пятен на экране отражает тот факт, что атомы не находятся в одинаковых начальных состояниях, а статистически распределены по λ различным дискретным состояниям. Иначе говоря, некоторые динамические переменные атома квантуются. Но поскольку атомы все практически находятся в основном состоянии (в противном случае они излучали бы), дело не может идти о квантовании энергии. Далее, наблюдаемый на экране эффект связан с направлением относительно магнитного поля, поэтому динамическая переменная, подверженная квантованию, должна зависеть от ориентации атома.

Помимо опыта Штерна и Герлаха, известно много других проявлений пространственного квантования. Отметим, в частности, так называемый эффект Зеемана (1896 г.), о котором нам еще придется говорить. Все эти явления имеют одно общее происхождение — квантование момента количества движения. Это будет показано в дальнейшем при изложении результатов квантовой механики.

Раздел IV. ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ И СТАРАЯ КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

§ 11. Недостаточность классической корпускулярной теории

Квантование некоторых физических величин — и это следует особенно подчеркнуть — есть экспериментальный факт, совершенно несовместимый с классической корпускулярной теорией вещества. Так, энергия системы классических корпускул есть по самой сути своей величина, изменяющаяся непрерывно. Как бы мы ни меняли законы взаимодействия, как бы ни выбирали динамические переменные, это основное положение нельзя изменить: тот факт, что энергия системы частиц может принимать только ряд определенных дискретных значений, есть результат, выходящий за рамки классической механики. То же замечание можно сделать относительно любой квантованной величины.

В соответствии с этим и *изменение во времени квантованной величины не может быть описано в строго классических понятиях*. Рассмотрим пример атома, первоначально находящегося в первом возбужденном состоянии E_1 , а затем испускающего фотон и переходящего в основное состояние. Если, пользуясь языком классической теории, мы будем пытаться описать изменение энергии такого атома во времени, то придется сделать заключение, что в некоторый момент энергии скачкообразно изменяется от E_1 до E_0 , поскольку всякое непрерывное изменение энергии запрещено. Однако нельзя предсказать, в какой именно момент времени произойдет этот скачкообразный переход. Действительно, если *динамическое состояние атома остается строго неизменным* в течение всего времени, предшествующего скачку, то нет никаких оснований утверждать, что скачок произойдет именно в данный, а не в любой последующий момент времени. Можно говорить только о вероятности (в единицу времени) того, что скачок вообще произойдет. Классическая физика, следовательно, неспособна адекватно описать такую ситуацию; само представление о скачке, происходящем в точно определенный момент времени, оказывается некорректным. Мы не можем рассматривать энергию системы как вполне определенную функцию времени. Единственное, что можно определить — это вероятность того, что атом, первоначально находившийся в возбужденном состоянии, в некоторый заданный последующий момент времени окажется в основном состоянии. Как мы увидим далее, число атомов, остающихся в возбужденном состоянии — подобно числу нераспавшихся радиоактивных ядер — уменьшается по экспоненциальному закону, характеристическая постоянная которого равна вероятности перехода в единицу времени или, что по существу одно и то же, обратной величине среднего времени жизни возбужденного состояния.

Так возникла проблема включения вновь открытых явлений квантования физических величин (ценой отказа от некоторых классических концепций) в некую согласованную теорию строения вещества, которая позволила бы вычислять точные значения квантованных величин, а также количественно описывать различные возможные переходы, например, вычислить среднее время жизни возбужденного состояния атома, которое было упомянуто выше. Эта программа была полностью осуществлена только после создания квантовой механики в ее современной форме. Однако еще ранее Бор и его школа (Крамерс, Зоммерфельд) создали первый набросок квантовой теории, способной, в частности, правильно предсказывать спектральные термы водородоподобных атомов. Несмотря на многие принципиальные трудности и ограниченность этой старой квантовой теории, полезно знать ее основные положения, чтобы лучше понять после-

дующее развитие теории. Кроме того, в старой квантовой теории был впервые использован важный эвристический принцип, игравший большую роль в развитии квантовой механики, а именно — принцип соответствия. Ему будет уделено основное внимание в последующем изложении результатов старой квантовой теории. Она была дополнена полуклассической теорией взаимодействия между светом и веществом, также основанной на принципе соответствия, но в данной книге мы не будем касаться этого вопроса ¹²⁾.

§ 12. Принцип соответствия

Принцип соответствия был сформулирован Бором только в 1923 г. ¹³⁾, но он явился руководящей идеей во всех его предшествующих работах. Этот принцип позволяет выяснить, в какой мере понятия и результаты классической механики могут помочь в построении и интерпретации правильной теории.

Мы уже обсуждали ранее, при введении световых квантов, область применимости классической теории излучения. То, что тогда было сказано, справедливо по отношению ко всей классической теории в целом. Она корректно объясняет очень большой диапазон физических явлений как в макроскопической области, так и в некоторых случаях в области микроскопической; отметим среди последних движение электронов в постоянных электрических и магнитных полях, тепловое движение атомов и молекул в газе и т. д. Главная трудность, с которой сталкивается классическая теория на микроскопическом уровне, состоит в характерных явлениях дискретности и разрывности значений физических величин.

Можно поэтому считать установленным, что *классическая теория «макроскопически корректна»*, т. е. она правильно описывает физические явления в том предельном случае, когда квантовые скачки могут считаться пренебрежимо малыми; во всех этих случаях предсказания истинной теории должны совпадать с результатами классической теории. Это очень важное ограничивающее условие, которому должна подчиняться квантовая теория. Можно более кратко сформулировать данное требование, сказав, что *асимптотически в пределе больших квантовых чисел результаты квантовой и классической теории должны совпадать*.

¹²⁾ См. *L. de Broglie, Le principe de correspondance et les interactions entre matière et rayonnement, Actualités Scientifiques et Industrielles, Hermann (1938)*.

¹³⁾ *N. Bohr, Zeitsch. f. Phys. 13, 117 (1923)*.

Для выполнения этого условия мы исходим из *существования формальной аналогии между квантовой и классической теориями*; это «соответствие» прослеживается вплоть до самых тонких деталей и может служить руководящей идеей при истолковании результатов новой теории.

§ 13. Применение принципа соответствия при вычислении постоянной Ридберга

Проверим, что выражение (7) для уровней энергии атома водорода согласуется с принципом соответствия, и покажем, что применение этого принципа позволяет однозначно получить численное значение постоянной R , входящей в эту формулу.

Согласно классической теории Резерфорда атом водорода состоит из одного электрона и одного протона, взаимодействующих по закону Кулона (потенциал $-e^2/r$). В соответствии с законами Кеплера, которые мы предполагаем известными читателю, электрон движется по эллиптической орбите, в одном из фокусов которой находится протон (мы предполагаем его бесконечно тяжелым). Каждой орбите соответствует некоторое значение энергии E (< 0) и некоторая частота $\nu_{\text{кл}}$ движения электрона по орбите. Эти величины зависят только от размеров большой оси эллипса и связаны между собой соотношением

$$\nu_{\text{кл}}(E) = \frac{1}{\pi e^2} \left(\frac{2|E|^3}{m} \right)^{1/2}, \quad (8)$$

где m — масса электрона.

При своем движении электрон испускает электромагнитное излучение в форме суперпозиции монохроматических волн с частотами $\nu_{\text{кл}}$ и кратными гармониками, причем число высших гармоник тем больше, чем больше эксцентриситет эллиптической орбиты. Это излучение происходит непрерывно и сопровождается непрерывным уменьшением энергии E .

Эта картина должна быть сопоставлена со скачкообразным процессом потери энергии электроном, предсказываемым теорией Бора. При очень больших n расстояние между уровнями энергии пропорционально $\frac{dE}{dn} = \frac{2Rh}{n^3}$; для всех оптических переходов, когда относительное изменение квантового числа $\Delta n/n$ очень мало, излучаемая частота, как и в классической теории, есть гармоника (порядка $\Delta n - 1$) некоторой основной частоты

$$\nu_{\text{кв}} \approx 2 \frac{R}{n^3} = 2 \left(\frac{|E_n|^3}{Rh^3} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

В предельном случае больших n энергия E_n изменяется практически непрерывно путем многочисленных мелких скачков, так что спектр испускаемых частот (точнее, низкочастотная часть

этого спектра, соответствующая наиболее малым квантам энергии) должен по принципу соответствия совпадать с классическим спектром. Иначе говоря,

$$\nu_{\text{кв}} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \nu_{\text{кл}}(E). \quad (10)$$

Сравнение выражений (8) и (9) показывает, что это условие выполняется, если принять

$$R = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3}. \quad (11)$$

Экспериментальное значение R известно с большой точностью ($\approx 10^{-6}$). Теоретическое значение (11) согласуется с ним с точностью до 10^{-4} . Это один из наиболее ярких успехов теории Бора¹⁴).

Эти рассуждения нетрудно распространить на случай водородоподобных атомов, состоящих из электрона и ядра заряда Ze , в частности, иона атома гелия ($Z = 2$). Достаточно во всех формулах заменить e^2 на Ze^2 . Теоретически полученные термы He^+ с той же удивительной точностью порядка 10^{-4} совпадают с наблюдаемыми экспериментально.

§ 14. Лагранжева и гамильтонова формы уравнений классической механики

Имея в виду дальнейшее обсуждение формального соответствия между квантовой и классической теориями, полезно напомнить некоторые результаты классической аналитической механики.

В самом общем случае динамическое состояние классической системы определяется переменными положения, т. е. обобщенными координатами q_1, q_2, \dots, q_R , и переменными скорости, т. е. производными по времени обобщенных координат $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R$; число степеней свободы системы обозначим буквой R ¹⁵). Если мы имеем дело с системой из n частиц, то в качестве переменных положения можно выбрать $3n$ декартовых координат этих частиц, но все последующее справедливо и при другом вы-

¹⁴) Чтобы претендовать на совпадение с экспериментальным значением столь высокой точности, необходимо учесть, что масса протона M на самом деле имеет конечное значение. Для этого следует в формуле (11) заменить массу m на приведенную массу $m' = mM/(m + M)$. Учитывая эту поправку ($\approx 5 \cdot 10^{-4}$), получаем, что теоретическое значение R несколько меньше экспериментального. Это различие имеет релятивистскую природу, что на практике выражается некоторым увеличением массы m' .

¹⁵) Мы здесь рассматриваем только системы без связей, иначе говоря, переменные q могут изменяться без всяких ограничений независимо друг от друга.

боре координат. Положение системы в каждый момент времени может быть представлено в R -мерном *конфигурационном пространстве* точкой M , имеющей координаты q_1, q_2, \dots, q_R . Задачей классической механики является нахождение законов эволюции системы во времени или, если угодно, законов движения точки M в конфигурационном пространстве.

Для очень большого числа динамических систем — только их мы и будем здесь рассматривать — законы движения можно написать, вводя некоторую функцию, характеризующую систему, — функцию Лагранжа:

$$L \equiv L(q_1, q_2, \dots, q_R; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R; t).$$

Координаты q удовлетворяют дифференциальным уравнениям второго порядка (уравнениям Лагранжа):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

Величины

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}$$

называются *обобщенными импульсами Лагранжа*. В том случае, когда q_r есть одна из декартовых координат частицы с массой m , а силы получаются из статического потенциала, величина p_r есть соответствующая компонента количества движения этой частицы $p_r = m\dot{q}_r$.

Законы движения могут быть также выражены в форме вариационного принципа. Действительно, система уравнений Лагранжа эквивалентна *принципу наименьшего действия* (Мопертюи — Гамильтон):

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \quad \delta M(t_1) = \delta M(t_2) = 0, \quad (12)$$

смысл которого состоит в следующем: из всех законов движения $M(t)$, позволяющих системе перейти из положения M_1 в момент времени t_1 в положение M_2 в момент времени t_2 , в действительности реализуется тот, который соответствует минимуму

интеграла $\int_{t_1}^{t_2} L dt$.

Другой чрезвычайно полезной формой выражения законов классической механики является *каноническая форма Гамильтона*. Заметим, что динамическое состояние классической системы в данный момент времени полностью определяется заданием ее R обобщенных координат q_1, q_2, \dots, q_R и R обобщенных импульсов p_1, p_2, \dots, p_R . Удобно ввести пространство $2R$ измерений, так называемое *фазовое пространство*, где дина-

мическое состояние представляется точкой P с координатами q и p . Если определить функцию Гамильтона формулой

$$H \equiv H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R; t) = \sum_{r=1}^R \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - L, \quad (13)$$

то уравнения движения записываются в канонической форме:

$$\dot{q}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r} \quad (r = 1, 2, \dots, R). \quad (14)$$

Это дифференциальные уравнения первого порядка. Задания координат и импульсов в начальный момент времени достаточно для определения их значений в любой последующий момент времени. Таким образом, если H не зависит явно от времени, то через каждую точку P фазового пространства проходит одна и только одна траектория, представляющая возможное движение системы.

В обычном случае L представляет собой разность между кинетической энергией T (являющейся квадратичной функцией \dot{q}) и потенциальной энергией V ; функция $H = T + V$ есть полная энергия системы, представленная как функция q и p . Однако формализм Лагранжа и Гамильтона применим при описании самого широкого класса динамических систем (см. задачу 4). Во всех случаях можно рассматривать H как полную энергию системы. Из уравнений Гамильтона следует, что $\dot{H} \equiv dH/dt = \partial H/\partial t$; это значит, что если функция Гамильтона не зависит от времени явно, то полная энергия системы есть интеграл движения. Такие системы называются консервативными.

В качестве примера рассмотрим электрон в кулоновском поле протона (предполагаемого бесконечно тяжелым). Пусть $\mathbf{r}(x, y, z)$ есть радиус-вектор электрона в системе координат с началом в точке, где находится протон, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ — скорость, $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ — импульс электрона. Функция Лагранжа есть

$$L = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{e^2}{r}.$$

Обобщенный импульс электрона имеет компоненты $p_x = \partial L/\partial v_x$, $p_y = \partial L/\partial v_y$, $p_z = \partial L/\partial v_z$, которые равны составляющим его количества движения. Из функции Гамильтона

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

получаем уравнения Гамильтона

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \text{grad} \frac{e^2}{r} = -e^2 \frac{\mathbf{r}}{r^3}.$$

Пользуясь этими уравнениями, легко проверить, что момент импульса (количества движения) $l = [rp]$ является интегралом движения: $dl/dt = 0$ (что является следствием центрально-симметричного характера потенциала $-e^2/r$) и что траектория электрона лежит в плоскости, проходящей через начало координат и перпендикулярной постоянному вектору l .

Аналогично можно получить уравнения движения, используя всякую другую систему координат. Для траекторий, расположенных в плоскости xy ($z = \dot{z} = 0$), в полярных координатах получаем ($x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$)

$$L = \frac{m}{2} [(\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2)] + \frac{e^2}{r}, \quad p_r = m\dot{r}, \quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi},$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r},$$

откуда следуют уравнения Гамильтона:

$$\begin{aligned} \dot{p}_\varphi &= 0, & \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi}{mr^2}, \\ \dot{p}_r &= \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2}, & \dot{r} &= \frac{p_r}{m}; \end{aligned} \tag{15}$$

p_φ равно абсолютной величине момента количества движения: это действительно интеграл движения.

§ 15. Правила квантования Бора — Зоммерфельда

Старая квантовая теория по существу представляет собой общий метод вычисления квантованных величин, основанный на постулатах Бора и принципе соответствия. Процедура такова: предполагается, что системы материальных частиц подчиняются законам классической механики; постулируется, что из всех возможных решений уравнений движения должны быть отобраны только те, которые удовлетворяют некоторым правилам, вводимым *ad hoc*. Происходит отбор некоторого дискретного семейства движений, причем согласно гипотезе только эти движения и могут реализоваться на практике. Каждому из возможных движений соответствует определенное значение энергии; дискретный ряд получаемых значений энергии представляет собой спектр квантованных энергетических уровней. Аналогично получают дискретный спектр разрешенных значений для любого другого интеграла движения.

Определение «правил квантования» есть центральная проблема старой квантовой теории. Она решается по существу на основе интуиции: сначала постулируются правила, а затем спектры квантованных физических величин, следующие из этих

правил, сравниваются с экспериментальными значениями. При этом важную роль играет принцип соответствия.

Существует очень простая ситуация, когда этот принцип позволяет без труда получить искомый результат: это случай, когда классическое движение является периодическим, причем частота есть функция одной только энергии

$$\nu_{\text{кл}} = \nu_{\text{кл}}(E).$$

Именно эта ситуация реализуется в атоме водорода (см. уравнение (8)). Пусть E_1, E_2, \dots, E_n есть последовательность квантованных значений энергии. Можно считать, что энергия системы есть непрерывная функция $E(n)$ квантового числа n , так что дискретность значений энергии является следствием дискретности значений аргумента n . Повторяя рассуждения § 13, касающиеся вычисления постоянной Ридберга, можно получить соотношение соответствия между классической и квантовой частотами (см. уравнение (10))

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \nu_{\text{кл}}(E),$$

откуда получается правило квантования

$$\int \frac{dE}{\nu_{\text{кл}}(E)} = nh + \text{const},$$

справедливое для больших значений n . Естественно распространить это правило на все значения n и положить

$$\int_{E_{\text{min}}}^E \frac{dE}{\nu_{\text{кл}}(E)} = nh \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (16)$$

(E_{min} — есть минимальное значение энергии классической системы). В случае атома водорода это правило квантования вновь приводит к формуле Бальмера.

Это правило применяется также и к периодическим системам с одной степенью свободы. В этом случае его можно выразить в форме, более удобной для обобщений. Пусть q есть координата положения такой системы, p — ее импульс, $H(q, p)$ — полная энергия. Фазовое пространство имеет два измерения, а периодическое движение представлено замкнутыми кривыми $H(q, p) = \text{const}$ в этом пространстве¹⁶⁾. Можно показать,

¹⁶⁾ Если q есть циклическая переменная (например, угловая переменная), иначе говоря, если значения q , отличающиеся на целые значения некоторого периода Q , представляют одинаковые конфигурации системы, то периодическое движение представляется в фазовом пространстве не замкнутой кривой, а кривой с периодом Q .

используя уравнения Гамильтона, что

$$\int_{E_{\min}}^E \frac{dE}{v(E)} = \oint_{H=E} p dq,$$

где символ $\oint_{H=E}$ означает интегрирование по полному периоду

движения с энергией E (интеграл $\oint p dq$ называется интегралом действия). Так мы получим правило квантования, эквивалентное правилу (16):

$$\oint p dq = nh \quad (n = 1, 2, \dots, \infty). \quad (17)$$

Формула определяет как разрешенные траектории в фазовом пространстве, так и соответствующие квантованные значения энергии. Это правило известно как *правило квантования Бора — Зоммерфельда*.

Вильсон и Зоммерфельд обобщили это правило на случай многопериодических систем. Это системы с несколькими степенями свободы, движение которых может быть представлено при соответствующем выборе обобщенных координат q_1, q_2, \dots, q_R и обобщенных импульсов p_1, p_2, \dots, p_R с помощью последовательности функций $p_1(q_1), p_2(q_2), \dots, p_R(q_R)$; иначе говоря, траектории в фазовом пространстве таковы, что каждый импульс зависит только от соответствующей координаты. Каждая функция $p_r(q_r)$ представляет периодическое движение с частотой ν_r ; движение всей системы является комбинацией периодических движений с частотами $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_R$. В этом случае правилами квантования служат R соотношений

$$\oint p_r dq_r = n_r h \quad (r = 1, 2, \dots, R); \quad (18)$$

R целых квантовых чисел n_1, n_2, \dots, n_R определяют квантованные траектории системы и квантованные значения различных интегралов движения, таких как энергия, момент количества движения и т. д. Энергия $E(n_1, n_2, \dots, n_R)$, рассматриваемая как функция переменных n_1, n_2, \dots, n_R , удовлетворяет условиям соответствия

$$\frac{\partial E}{\partial n_r} \underset{n_r \rightarrow \infty}{\sim} h\nu_r \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

В качестве приложения кратко рассмотрим квантование атома водорода. После выбора плоскости электронной орбиты мы получаем задачу, уравнения которой в полярных координатах уже были выписаны (уравнения (15)). Момент импульса

и энергия являются интегралами движения. Если фиксировать соответствующие значения L (≥ 0) и E (< 0) этих двух величин, мы получим возможную траекторию классического движения: это эллипс с эксцентриситетом $\sqrt{1 + 2L^2 E / me^4}$.

Компоненты импульса p_φ и p_r являются функциями соответствующих им сопряженных координат. Действительно

$$p_\varphi = L, \quad \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r} = E.$$

Поэтому можно применить правила квантования Бора — Зоммерфельда:

$$\oint p_\varphi d\varphi = lh, \quad \oint p_r dr = kh,$$

где l — азимутальное квантовое число и k — радиальное квантовое число являются целыми положительными числами (или нулями). Первое правило дает квантованное значение момента импульса (количества движения)

$$L = l\hbar.$$

Второе же правило, после достаточно длинного, но нетрудного вычисления, приводит к соотношению

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 me^4}{(-E)}} - 2\pi L = kh,$$

откуда, вводя «главное квантовое число» $n = l + k$, получаем формулу Бальмера

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

с тем же значением постоянной Ридберга, что и полученное ранее (уравнение (11)).

Квантованная энергия зависит только от суммы двух квантовых чисел l и k . Это свойство, характерное для кулоновского потенциала, связано с тем обстоятельством, что азимутальная и радиальная частоты равны друг другу: $\nu_\varphi = \nu_r$. Энергии E_n соответствуют n квантованных орбит, определяемых значениями $l = 1, 2, \dots, n$ (по причинам, которые мы не будем здесь обсуждать, значение $l = 0$ исключается); это эллипсы с эксцентриситетом $\sqrt{1 - l^2/n^2}$. Значение $l = n$ соответствует круговой орбите¹⁷⁾ (см. рис. 6).

Те же правила квантования можно применить к релятивистским уравнениям движения и получить таким образом реляти-

¹⁷⁾ Квантование круговых орбит позволило Бору уже в 1913 г. получить формулу Бальмера. Квантование эллиптических орбит было проведено Зоммерфельдом, который распространил теорию на релятивистский случай (см. ниже).

вистские поправки в теории атома водорода. Получающееся значение постоянной Ридберга находится в еще лучшем согласии с опытом (см. сноску ¹⁴). При этом происходит снятие «вырождения» уровня энергии: каждому значению n соответствуют n близких, но различных значений энергии, соответствующих различным значениям момента импульса $l\hbar$. На опыте действительно наблюдается тонкая структура спектра атома водорода, которая очень хорошо совпадает с теоретическими предсказаниями.

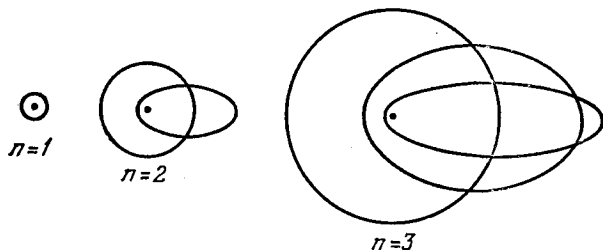


Рис. 6. Орбиты Бора основного уровня ($n=1$) и двух первых возбужденных уровней ($n=2,3$) атома водорода. Соблюдены относительные размеры орбит.

Обратимся теперь к проблеме пространственного квантования. Предшествующее рассмотрение, когда квантовались орбиты, лежащие в одной плоскости, не включало никакого выделенного направления и позволило определить только квантовые спектры скалярных величин, таких, как энергия или величина момента импульса ($L = l\hbar$). Существует общее правило пространственного квантования для систем, обладающих аксиальной симметрией (например, атом в постоянном магнитном поле). В этом случае интегралом движения является L_z — составляющая момента импульса по оси симметрии Oz . В классической механике можно показать, что эта переменная является канонически сопряженной переменной φ , фиксирующей ориентацию системы относительно оси Oz . Следовательно,

$$\int L_z d\varphi = mh \quad (m — \text{целое})$$

и поскольку L_z постоянно

$$L_z = m\hbar. \quad (19)$$

Составляющая момента импульса по направлению оси аксиальной симметрии системы равна целому числу (положительному или отрицательному) постоянных Планка \hbar . Число m называется *магнитным квантовым числом*.

§ 16. Достижения и ограниченность старой теории квантов

На этом мы закончим изложение результатов старой теории квантов. Она позволила значительно продвинуться в исследовании атомных спектров, так как дала общий метод вычисления спектральных термов большого числа атомных и молекулярных систем. Результаты, полученные для атома водорода, без труда обобщаются на случай водородоподобных систем He^+ , Li^{++} и атомов щелочных металлов. Теория применима также к колебательным и вращательным спектрам молекул, рентгеновским спектрам атомов, нормальному эффекту Зеемана. Дополненная полуклассической теорией взаимодействия вещества и излучения, старая теория квантов дает также различные правила отбора и вероятности возможных квантовых переходов. Во всех этих случаях теория находится в прекрасном согласии с опытом, если не считать отдельных расхождений для очень малых квантовых чисел; эти расхождения могут быть устранены, если добавить к правилам квантования некоторые эмпирические поправки (примером является запрещение нулевого значения азимутального квантового числа, $l = 0$).

Тем не менее эта теория не является полной. Правила Бора — Зоммерфельда применимы только для периодических или многопериодических систем. Не существует правила квантования аperiодических движений. Так, механизм одного из основных экспериментов — опыта Франка и Герца — остается необъясненным. Теория Бора — Зоммерфельда дает квантовые уровни энергии атомной мишени, однако она не в состоянии описать траектории электронов пучка и объяснить в деталях неупругие столкновения электронов и атомов мишени. Вообще говоря, все явления столкновений остаются вне рамок этой теории. Но даже при вычислении спектральных термов успехи теории ограничиваются только простейшими системами; многочисленные трудности возникают при попытках строго поставить задачу о квантовании сложных атомов; имеются случаи резкого расхождения с опытом, например, при вычислении термов атома гелия (не ионизованного) или аномального эффекта Зеемана.

Далее, теория не лишена двусмысленностей и противоречий. Примером являются правила пространственного квантования. Правило квантования составляющей L_z момента импульса для системы, имеющей аксиальную симметрию с осью Oz , должно было бы распространяться и на случай сферической симметрии, так как это есть случай симметрии относительно любой оси, проходящей через начало координат. При этом мы пришли бы к абсурдному выводу, что составляющая момента импульса по направлению любой оси, проходящей через начало координат, должна быть целой кратной \hbar .

Однако принципиальные трудности старой теории квантов оказываются гораздо более серьезными. Правила квантования представляют собой чисто формальные ограничения, накладываемые на решения классических уравнений движения; они вводятся эмпирически. Полностью отсутствует более глубокое обоснование этих правил. В то же время само понятие траектории частицы трудно согласовать с требованиями правил квантования. Представление о движении по траектории подразумевает, что частица в каждый момент времени имеет вполне определенное положение и импульс, причем эти величины должны быть непрерывными функциями времени. Какой же может быть при этих условиях траектория частицы, подобной электрону в опыте Франка и Герца? Если этот электрон движется по некоторой траектории и его энергия изменяется непрерывно, то следует отказаться от возможности передачи этой энергии атому отдельными порциями — квантами, т. е. отказаться от квантования энергетических уровней атома мишени. Обратно, постулируя существование дискретных уровней энергии атома, мы должны оставить идею о движении электрона по классической траектории и, следуя логике изложения, отбросить понятие классической траектории вообще. В дальнейшем, в гл. II и IV, мы увидим, что отказ от понятия классической траектории вполне оправдан, и проанализируем его физический смысл и следствия. Как бы то ни было, мы должны отказаться от классических уравнений движения частицы, но тогда возникает вопрос, какой же физический смысл можно приписать решениям этих уравнений, которыми, по предположению, являются квантованные траектории движения электрона в атоме?

Старая теория квантов вне всякого сомнения явилась большим шагом вперед. Предсказывая на основе нескольких простых правил значительную массу экспериментальных результатов, она дала общую схему феноменологического объяснения структуры атомных спектров и в этом смысле сыграла важную роль в истории современной физики. Однако эта странная и причудливая комбинация классической механики и рецептов, вводимых *ad hoc*, никак не может рассматриваться в качестве полной и законченной теории.

§ 17. Заключение

В этой главе мы проанализировали основные трудности, с которыми столкнулась классическая теория при проникновении в область микроскопической физики. Эти трудности возникли, когда была сделана попытка понять и описать механизм взаимодействия вещества и излучения. Главная особенность явлений на микроскопическом уровне состоит в характерной прерыв-

ности, связанной с существованием неделимого кванта действия \hbar .

Этот *атомизм действия*, по-видимому, является одним из самых фундаментальных свойств явлений природы. В макроскопических масштабах можно рассматривать величину \hbar как бесконечно малую и удовлетвориться классическим описанием физических явлений, когда эволюция физических систем представляется динамическими переменными, точно определяемыми в каждый момент и непрерывно изменяющимися во времени. Напротив, в атомной и субатомной физике мы уже не можем пренебречь величиной \hbar , здесь наблюдаются чисто квантовые явления. Пошатнулось все здание классической теории.

Классическое волновое описание электромагнитного излучения не может быть согласовано с тем опытным фактом, что передача энергии и импульса между веществом и излучением происходит неделимыми порциями — квантами. Фотоэлектрический эффект, эффект Комптона можно объяснить, только если представлять себе свет как поток корпускул, однако гипотеза существования фотонов не согласуется с явлениями интерференции и дифракции, в которых свет ведет себя как суперпозиция волн. Если придерживаться языка классической физики, то связанное и непротиворечивое описание всей совокупности световых явлений невозможно; в зависимости от условий эксперимента для его истолкования приходится прибегать к одному из двух несовместимых представлений: или потоку корпускул, или суперпозиции волн. Соответствие между этими представлениями дается основными соотношениями (4), которые содержат постоянную Планка \hbar . Возникающий дуализм волна — частица проще всего интерпретировать на статистической основе, постулируя, что интенсивность волны в некоторой точке пространства пропорциональна вероятности обнаружения в этой точке соответствующего фотона.

Что касается материальных систем, то здесь эффект квантования значений некоторых физических величин делает несостоятельной концепцию, согласно которой вещество состоит из корпускул, движение которых подчиняется законам механики Ньютона. Примерами экспериментальных фактов, противоречащих классической корпускулярной теории, являются квантование энергетических уровней атомов, квантование ориентации атомов и молекул в определенных внешних условиях.

В поисках новой согласованной теории важно учитывать те элементы классической теории, которые могут быть сохранены. В первую очередь следует упомянуть фундаментальные законы сохранения энергии и импульса; ни один из экспериментальных фактов, обсуждавшихся в этой главе, не противоречит этим законам, поэтому можно сделать обоснованный вывод, что эти

основные законы остаются справедливыми и для микроскопических явлений. Далее, единственной причиной неудач классической теории, по-видимому, является атомизм величины действия; классическая теория сохраняет свою силу в макроскопических масштабах или, в более широком смысле, в тех случаях, когда квантовые скачки могут считаться пренебрежимо малыми. Это второе утверждение лежит в основе принципа соответствия, сформулированного в конце главы. Успехи старой квантовой теории, удивительные для теории со столь противоречивыми основаниями, хорошо иллюстрируют плодотворность этого фундаментального эвристического принципа.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Рассматривается рассеяние монохроматических фотонов свободными электронами (эффект Комптона). Определить изменение длины волны, величину и направление импульса отдачи электрона в зависимости от угла рассеяния фотона, предполагая: а) что электрон первоначально покоится; б) что электрон первоначально имеет импульс P в направлении исходного пучка фотонов. Какова в обоих случаях максимальная величина импульса, передаваемого электрону?

2. Обсудить на примере эксперимента Юнга с интерференцией от двух щелей волновой и корпускулярный аспекты природы света. Показать, что представление о траектории каждого фотона, проходящей через одну из щелей, несостоятельно.

3. Гироскоп обладает магнитным моментом μ , пропорциональным моменту импульса: $\mu = Ml$. Исходя из выражения для магнитной энергии $-\mu\mathcal{H}$, вывести уравнения движения l в постоянном магнитном поле \mathcal{H} и показать, что гироскоп совершает прецессионное движение с круговой частотой $\omega_L = M\mathcal{H}$ (частота Лармора).

4. В нерелятивистском пределе классические уравнения движения электрона в электромагнитном поле суть

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = e \left(\mathcal{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathcal{H}] \right). \quad (a)$$

Пусть, далее, A и ϕ являются соответственно векторным и скалярным потенциалами этого поля:

$$\mathcal{E} = -\text{grad } \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}; \quad \mathcal{H} = \text{rot } A.$$

Показать, что уравнения движения следуют из функции Лагранжа

$$L = \frac{mv^2}{2} + e \left(\frac{vA}{c} - \phi \right).$$

Вычислить обобщенный импульс и написать функцию Гамильтона.

5. Уравнения (a) задачи 4 остаются справедливыми и в релятивистской области, если массу покоя заменить «релятивистской массой» $M = m[1 -$

$-(v^2/c^2)]^{-1/2}$. Проверить, что формализм Лагранжа и Гамильтона остается справедливым, причем уравнения получаются из функции Лагранжа

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \left(\frac{v\mathbf{A}}{c} - \Phi \right).$$

Показать, что функция Гамильтона в этом случае имеет вид

$$H = \left[m^2 c^4 + \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 \right]^{1/2} + e\Phi,$$

где \mathbf{p} есть обобщенный импульс, т. е. вектор с компонентами p_x, p_y, p_z .

Заметим, что $\mathbf{p} = M\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$ и $H = Mc^2 + e\Phi$; H и $\mathbf{p}c$ образуют 4-вектор в пространстве-времени, аналогично Φ и \mathbf{A} . Имеет место соотношение $(H - e\Phi)^2 - (\mathbf{p}c - e\mathbf{A})^2 = m^2 c^4$.

6. Материальная точка с массой m вынуждена перемещаться по оси x под действием возвращающей силы $-Kx$, пропорциональной расстоянию от начала координат (*гармонический осциллятор*). Применить к этой динамической системе правило квантования Бора — Зоммерфельда: вычислить энергию, период колебаний и амплитуду квантованных траекторий.

7. Проквантовать круговые электронные орбиты водородного атома, применяя правило Бора — Зоммерфельда. Определить энергию, период и радиус основной орбиты ($mc^2 = 0,51 \text{ Мэв}$; $\hbar c/e^2 \simeq 137$) и найти в этом частном случае релятивистскую поправку. Проверить, что в пределе больших квантовых чисел частоты Бора стремятся к частотам, предсказываемым классической электродинамикой (*принцип соответствия*).