

§ 1. Исторический обзор и общий план последующих глав

Основание квантовой механики приходится на период между 1923 и 1927 годами. Почти одновременно были предложены две ее эквивалентные формулировки: матричная механика и волновая механика.

Исходным пунктом *матричной механики*¹⁾ явился критический анализ положений старой квантовой теории. Точка зрения Гейзенберга может быть выражена следующим образом. Во всякой физической теории следует отличать понятия и величины, физически наблюдаемые от физически ненаблюдаемых; первые по необходимости должны фигурировать в теории, вторые же без ущерба для теории могут быть модифицированы или вовсе опущены. При построении удовлетворительной теории микроскопических явлений следует по возможности исходить только из наблюдаемых величин. В старой квантовой теории некритически использовались многие понятия, не имеющие реальной экспериментальной основы; это и явилось причиной ее неудач.

Примером экспериментально не обоснованного понятия является электронная орбита. Зададимся вопросом, можно ли на опыте проследить за движением электрона по боровской орбите атома водорода? ²⁾ При наблюдении движения мы должны фиксировать последовательные положения электрона в пространстве, причем ошибка в измерении каждого положения должна, естественно, быть значительно меньше среднего радиуса a исследуемой орбиты. Подобные измерения можно было бы провести с помощью рентгеновских лучей достаточно малой длины волны $\lambda \ll a$. Однако столкновение каждого рентгеновского кванта с электроном, согласно теории эффекта Комптона, сопровождается передачей импульса порядка h/λ ($\gg h/a$), что существенно возмущает движение наблюдаемого электрона. Читатель без труда

¹⁾ W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. 33, 879 (1925); M. Born, P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. 34, 858 (1925); M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. 35, 557 (1926); P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 109, 642 (1925).

²⁾ Ограничения возможностей наблюдения, которые мы имеем в виду, не связаны с совершенством измерительной техники; эти границы ставит сама природа вещей.

проверит (см. задачу 1), что возмущение тем значительнее, чем меньше квантовое число, характеризующее орбиту; например, если электрон находится на основной орбите ($n=1$), то средняя энергия, передаваемая при столкновении, равна по меньшей мере энергии ионизации атома. Это неконтролируемое возмущение состояния наблюдаемой системы измерительным устройством ставит предел точности, которую можно надеяться получить при измерении орбиты электрона. При малых квантовых числах любое, даже достаточно грубое измерение параметров орбиты обречено на неудачу. Но поскольку не существует эксперимента, позволяющего доказать, что электрон в атоме водорода действительно перемещается по определенной орбите, ничто не мешает нам отказаться от самого понятия орбиты электрона. Иначе говоря, из того факта, что атом находится в некотором состоянии с точно фиксированной энергией, не следует с необходимостью, что его электрон в каждый момент времени обладает строго определенными положением и импульсом³⁾.

Матричная механика Гейзенберга, Борна и Иордана не включает понятия электронной орбиты. Рассматривая только наблюдаемые на опыте величины, такие как частоты и интенсивности излучения атомов, теория каждой физической величине сопоставляет некоторую матрицу. В отличие от алгебры обычных величин матричная алгебра в общем случае некоммутативна⁴⁾, именно это существенное обстоятельство отличает новую матричную механику от механики классической. Уравнения движения динамических переменных квантовой системы являются матричными уравнениями. Следуя принципу соответствия, мы принимаем, что эти уравнения формально совпадают с уравнениями (содержащими обычные величины), которые описывают соответствующую классическую систему.

Волновая механика Шредингера⁵⁾ внешне выглядит совершенно иной теорией. Истоки ее восходят к работам Луи де Бройля⁶⁾, посвященным материальным волнам (волнам

³⁾ Этот вывод следует сравнить с результатами обсуждения опыта Франка и Герца в конце первой главы, где было показано, что существование непрерывной траектории бомбардирующего электрона несовместимо с квантованием энергетических уровней атома мишени. Признание существования дискретных квантовых уровней энергии атома ведет к отказу от понятия траектории электрона.

⁴⁾ Определение матриц и изложение их основных свойств содержится в гл. VII и VIII, где мы увидим, что существует тесная связь между матрицами и линейными операторами, о которых пойдет речь ниже (§ 11).

⁵⁾ E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 361, 489 (1925); 80, 437 (1926); 81, 109 (1926).

⁶⁾ L. de Broglie, Nature 112, 540 (1923); Диссертация (1924); Annales de Physique 2 (1925).

вещества). Пытаясь установить основные принципы единой теории вещества и излучения, де Бройль выдвинул гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм выражает фундаментальное свойство всех микроскопических объектов и, следовательно, вещество, подобно излучению, также обнаруживает и волновые, и корпускулярные свойства. Установив соответствие между динамическими переменными корпускулы и величинами, характеризующими ассоциированную с корпускулой волну, он сумел с помощью полуколичественных рассуждений получить правила квантования Бора — Зоммерфельда. Предположение де Бройля о волновой природе частиц вещества получило непосредственное подтверждение через несколько лет в результате открытия явлений дифракции частиц, аналогичных соответствующим явлениям волновой оптики. Между тем Шредингер, развивая и обобщая понятие волн вещества, открыл уравнение распространения волновой функции, представляющей данную квантовую систему. Это фундаментальное уравнение может быть выведено путем применения простого правила соответствия из функции Гамильтона соответствующей классической системы. Уравнение Шредингера лежит в основе волновой механики.

Как показал Шредингер⁷⁾, волновая механика и матричная механика эквивалентны. Они дают две частные формулировки одной единой теории, которая может быть представлена в самом общем виде. Разработка общего формализма квантовой теории была осуществлена Дираком⁸⁾. В результате возникла квантовая нерелятивистская теория материальных частиц. Она была дополнена квантовой теорией электромагнитного поля⁹⁾, что привело к построению единого согласованного теоретического метода, позволяющего исследовать все задачи, касающиеся физики систем материальных частиц в нерелятивистском приближении и их взаимодействия с электромагнитным полем. Добавим, что внутренняя непротиворечивость теории и глубокое понимание физического смысла ее формализма были достигнуты только после работ Борна, Гейзенберга и Бора¹⁰⁾. Основное

⁷⁾ E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 734 (1926).

⁸⁾ P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, Oxford Clarendon Press, 1 изд. 1930, 4 изд. 1958. Русский перевод: П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, пер. с 4-го издания, Физматгиз, 1960.

⁹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 114, 243, 710 (1927); P. Jordan, W. Pauli, Zeitsch. f. Phys. 45, 151 (1928).

¹⁰⁾ M. Born, Zeitsch. f. Phys. 38, 803 (1926); W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. 43, 172 (1927); N. Bohr, Naturwiss. 16, 245 (1928); 17, 483 (1929); 18, 73 (1930). Глубокое освещение физической интерпретации теории можно найти в книгах: W. Heisenberg, Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, Mannheim, 1958; N. Bohr, Atomic physics and human knowledge, Wiley, N. Y., 1958 — русский перевод: Н. Бор. Атомная физика и человеческое познание, ИЛ, 1961. В этих работах содержится изложение так называемой

содержание этой книги посвящено изложению аппарата и приложений нерелятивистской квантовой механики. Проблемы релятивистской квантовой механики будут рассмотрены только в последней части; мы ограничимся в основном изложением релятивистской теории электрона Дирака¹¹⁾, ее основных применений и трудностей.

Наиболее элегантно и во многих отношениях наиболее удовлетворительным способом изложения квантовой теории является тот, который основывается на общем формализме. Однако при этом сущность физических явлений может оказаться скрытой за математическим аппаратом, имеющим абстрактный характер. Волновая механика с ее более привычными представлениями о волнах и уравнениях в частных производных лучше подходит для первого ознакомления с теорией. Кроме того, именно в этой форме квантовая теория чаще всего используется в приложениях. Поэтому мы приступим к квантовой теории с общего изложения волновой механики. Эту главу мы начнем обсуждением понятия о волнах вещества, затем получим уравнение Шредингера и обсудим его основные свойства; в частности будет показано, каким образом с помощью этого уравнения определяются уровни энергии стационарных состояний.

Чтобы научиться работать с уравнением Шредингера, мы посвятим гл. III изучению простых задач, касающихся квантовых систем в одном измерении, и докажем несколько теорем об этих системах. Это даст возможность подойти к общим проблемам истолкования квантовой теории; им будет посвящена гл. IV. Глава V посвящена развитию формализма волновой механики и его статистической интерпретации, согласно принципам, сформулированным в гл. IV.

статистической интерпретации квантовой механики копенгагенской школы. Именно этой интерпретации мы будем придерживаться в данной книге. После резкой борьбы мнений и споров она была принята подавляющим большинством физиков. Тем не менее, эта интерпретация насчитывала (и насчитывает до сих пор) немало непримиримых противников, среди которых надлежит отметить Эйнштейна, Шредингера и де Бройля. Речь идет о разногласиях, которые не могут быть разрешены на основании только результатов экспериментов. Разногласия касаются общих философско-мировоззренческих вопросов истолкования науки, а не физической науки как таковой. Освещение основных этапов дискуссии можно найти в книгах: *Albert Einstein, Philosopher — Scientist*, P. A. Schilpp ed., Tudor Publ. Co., N. Y., 1949 and 1951 (см. в особенности статьи Бора и Эйнштейна) и *L. de Broglie, La Théorie de la Mesure en Mécanique Ondulatoire*, Gauthier — Villars, Paris, 1957. См. также *А. Эйнштейн*, Собрание научных трудов, том 3, «Наука», 1966. Физические и теоретико-познавательные основы квантовой механики рассмотрены в книге: *В. А. Фок*, Начала квантовой механики, «Наука», 1976 (см. в особенности гл. I этой книги).

¹¹⁾ *P. A. M. Dirac*, Proc. Roy. Soc. A117, 610 (1928); A118, 351 (1928).

В гл. VI рассмотрено квазиклассическое приближение в волновой механике. И только после того как будет представлена общая картина теории на языке волновой механики мы перейдем в гл. VII и VIII к изложению формального аппарата квантовой теории.

Раздел I. ВОЛНЫ ВЕЩЕСТВА

§ 2. Введение

Открытие двойственной — волновой и корпускулярной — природы света явилось одним из наиболее впечатляющих результатов введения квантов в физику. Предположим, что и вещество обладает аналогичными свойствами корпускулярно-волнового дуализма; подобно тому как электромагнитная волна ассоциируется с фотоном, допустим, что каждой материальной частице сопоставлена волна, круговая частота которой ω связана с энергией частицы E соотношением Эйнштейна $E = \hbar\omega$. Если принять эту точку зрения, то атом должен будет обладать свойствами резонирующей полости (резонатора) с дискретным рядом собственных частот; это позволит объяснить эффект квантования энергетических уровней атома.

При этом открывается возможность построить единую теорию, в которой вещество и излучение будут выступать как разновидности объектов одной природы, обладающих свойствами и волны, и корпускулы. Эти предположения, руководившие де Бройлем в его теории волн вещества, оказались, как мы увидим в дальнейшем, полностью оправданными.

Основные свойства волн вещества получаются по аналогии с оптикой. Как и в случае фотонов, мы допускаем, что значение интенсивности ассоциированной волны в каждой точке пропорционально вероятности обнаружить частицу в этой точке. Частица будет локализованной в пространстве тем лучше, чем меньшую область в пространстве занимает волна. Условия справедливости классической механики реализуются тогда, когда в течение всего времени область локализации волны можно рассматривать как точку и приписать частице определенную траекторию движения. Аналогичная ситуация встречается в оптике, если длиной волны света можно пренебречь по сравнению с другими характерными длинами: это *приближение геометрической оптики*, когда волновые свойства не проявляются. Приближение справедливо, когда оптические свойства среды, в которой распространяется свет, остаются практически постоянными на расстояниях порядка нескольких длин волн ($|\text{grad } \lambda| \ll 1$). Это приводит к заключению, что классическая теория частиц должна быть применима в случае отсутствия