

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

внешних полей или медленно меняющихся полей, а также если мы не стремимся слишком точно локализовать частицу. Эти выводы находятся в согласии с общеизвестными результатами, касающимися движения атомных и субатомных частиц в квазистатических и квазиоднородных полях: траектории заряженных частиц в статических электрических и магнитных полях, отклонения парамагнитных атомов в опыте Штерна—Герлаха и т. д. В этих предельных случаях теория волн вещества должна быть эквивалентной классической теории частиц (принцип соответствия).

§ 3. Свободный волновой пакет. Фазовая и групповая скорости

Рассмотрим волновое движение в однородной и изотропной среде. Наиболее простым типом волны является плоская монохроматическая волна

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (1)$$

которая представляет колебание с длиной волны $\lambda = 2\pi/k$, распространяющееся в направлении волнового вектора \mathbf{k} с постоянной скоростью. Скорость, о которой идет речь, есть скорость перемещения плоскости равной фазы, или *фазовая скорость*

$$v_{\varphi} = \omega/k.$$

Частота ω не зависит от направления \mathbf{k} , но, вообще говоря, может зависеть от абсолютной величины этого вектора. Поскольку всякая волна может рассматриваться как суперпозиция плоских монохроматических волн, знания «закона дисперсии» $\omega(\mathbf{k})$ достаточно для исследования поведения любой волны с течением времени.

Согласно нашей гипотезе каждая частота ω соответствует вполне определенной энергии частицы

$$E = \hbar\omega. \quad (2)$$

Естественно поэтому сопоставить волну (1) прямолинейному равномерному движению с энергией E в направлении \mathbf{k} .

Изучение классического приближения позволит нам связать \mathbf{k} с импульсом \mathbf{p} частицы. Для этого следует сопоставить частице волну конечной протяженности. Волна (1), конечно, не удовлетворяет этому требованию, но ему можно удовлетворить, если воспользоваться суперпозицией волн с близкими волновыми векторами. Это значит, что следует рассмотреть *волновой пакет*

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{r}-\omega't)} d\mathbf{k}'.$$

Обозначим буквами A и α модуль и фазу амплитуды f , соответственно. По предположению A обладает заметной величиной только в некоторой области, окружающей k . Следует выяснить в какой мере и при каких условиях «движение» волнового пакета может быть сопоставлено движению классической частицы.

Ради простоты рассмотрим вначале волновой пакет в одном измерении

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k') e^{i(k'x - \omega't)} dk'.$$

Положим

$$\varphi = k'x - \omega't + \alpha,$$

тогда $\psi(x, t)$ есть интеграл от произведения функции A , имеющей резкий максимум в области D шириной Δk , окружающей точку $k' = k$, и осциллирующей функции $e^{i\varphi}$. Если осцилляции функции $e^{i\varphi}$ в области D достаточно многочисленны, то вклады различных частей области аннулируют друг друга, так что величина ψ оказывается крайне малой. Наибольшие абсолютные значения ψ получаются в том случае, когда фаза φ остается почти постоянной в области D , т. е. $d\varphi/dk \approx 0$ (символ d/dk означает производную по k' , когда $k' = k$). Следует потребовать, чтобы $e^{i\varphi}$ имела не более одной осцилляции в области D :

$$\Delta k \left| \frac{d\varphi}{dk} \right| \leq 1.$$

Поскольку

$$\frac{d\varphi}{dk} = x - t \frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk},$$

волна $\psi(x, t)$ практически локализована в области с размерами

$$\Delta x \approx \frac{1}{\Delta k},$$

окружающей «центр волнового пакета», определенный условием $(d\varphi/dk) = 0$, т. е.

$$x = t \frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk}.$$

Эта точка равномерно движется со скоростью

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad (3)$$

которая называется *групповой скоростью* волны $e^{i(kx - \omega t)}$. Именно эта скорость v_g , а не фазовая скорость v_φ , должна быть отождествлена со скоростью частицы в классическом приближении предельной локализации пакета:

$$v = \frac{dE}{dp} \quad \left(\approx \frac{p}{m} \text{ в нерелятивистском приближении} \right).$$

Из условия $v = v_g$ и соотношения (2) находим¹²⁾ соотношение де Бройля

$$p = \hbar k = h/\lambda. \quad (4)$$

Это рассуждение без труда обобщается на волновой пакет в трех измерениях: центр пакета равномерно перемещается со скоростью

$$v_g = \text{grad}_k \omega, \quad (3')$$

причем групповая скорость должна быть отождествлена со скоростью частицы

$$v = \text{grad}_p E.$$

Последнее соотношение вместе с соотношением (2) позволяет найти связь¹³⁾ между динамическими переменными частицы и величинами, характеризующими ассоциированную ей волну:

$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k. \quad (5)$$

Эти соотношения идентичны соотношениям (1.4), полученным для случая фотона.

В заключение рассмотрим полученные результаты с точки зрения принципа относительности.

В нерелятивистском приближении энергия E определяется только с точностью до некоторой постоянной; изменить начало отсчета энергии значит добавить к частоте $\omega(k)$ некоторую постоянную частоту ω_0 (уравнение (2)), т. е. умножить функцию $\psi(r, t)$ на фазовый фактор $e^{-i\omega_0 t}$. Это не меняет предшествующих результатов, касающихся движения волнового пакета, и соотношений (5), которые из них вытекают.

Однако полученные результаты ни в коей мере не зависят от нерелятивистского приближения. Принцип относительности позволяет определить точную энергию $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ и соответствующую ей частоту ω . Энергия E и импульс p являются компонентами одного 4-вектора (принимая $c = 1$). То же самое можно сказать относительно частоты ω и волнового вектора k . Соотношения (5) удовлетворяют принципу относительности: они означают, что 4-векторы (E, p) и (ω, k) пропорциональны друг другу.

¹²⁾ Строго говоря, эти два условия позволяют определить k как функцию p только с точностью до аддитивной постоянной. Эта постоянная определяется из того условия, что соответствие между p и k не должно зависеть от направления движения по оси координат.

¹³⁾ Второе соотношение (5) получается с точностью до постоянного вектора, который мы выбираем равным нулю, чтобы соотношение не зависело от вращения системы координат (см. предшествующую сноску).

§ 4. Волновой пакет в медленно меняющемся поле

Предшествующие результаты и, в частности, соотношения (5) справедливы и в случае, когда частицы движутся в медленно меняющемся поле, причем условие классического приближения сводится к требованию, чтобы изменения поля на расстояниях порядка длины волны частицы были пренебрежимо малы.

Законы распространения соответствуют законам геометрической оптики. В частности, пакет волн ограниченных размеров, аналогичный тем, которые рассматривались в предыдущем параграфе, следует вдоль луча со скоростью, равной групповой скорости пакета. Чтобы можно было отождествить движения волнового пакета и классической частицы, необходимо:

а) чтобы лучи, соответствующие (круговой) частоте ω , были идентичны классическим траекториям частоты с энергией $E = \hbar\omega$;

б) чтобы групповая скорость вдоль каждого луча была равна скорости соответствующей классической частицы.

Траектории классической частицы определяются принципом наименьшего действия (1.12); если рассматривать траектории с заданной энергией E , то функция Лагранжа, согласно уравнению (1.13), есть $p \frac{dr}{dt} - E$, и принцип записывается в виде

$$\delta I_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} p dr = 0.$$

Следовательно интеграл I_{12} , вычисляемый вдоль некоторой кривой, соединяющей точки M_1 и M_2 , имеет экстремальное значение, когда эта кривая есть траектория истинного движения частицы от M_1 к M_2 . Импульс p ¹⁴⁾, вообще говоря, есть функция положения частицы r и ее скорости $v = dr/dt$, т. е. функция точки положения на кривой и направления касательной к кривой в этой точке. В случае нерелятивистской частицы в области действия скалярного потенциала $V(r)$:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad \text{и} \quad p = mv, \quad (6)$$

причем импульсы и скорости параллельны ($p \parallel dr$). Но принцип наименьшего действия имеет силу и в более общих случаях, например, для частицы, движущейся в магнитном поле.

При заданной частоте ω лучи в геометрической оптике определяются другим вариационным принципом, принципом Ферма,

¹⁴⁾ Во избежание недоразумений отметим, что под импульсом p мы всюду подразумеваем вектор, компоненты которого суть производные функции Лагранжа по компонентам скоростей (этот вектор еще называют обобщенным импульсом или канонически сопряженным импульсом); под количеством движения мы понимаем произведение скорости на массу.

который может быть выражен в следующей форме:

$$\delta J_{12} \equiv \delta \int_{M_1}^{M_2} \mathbf{k} \, d\mathbf{r} = 0,$$

где \mathbf{k} есть волновой вектор. Интеграл J_{12} , вычисленный вдоль данной кривой, соединяющей точки M_1 и M_2 , называется оптической длиной пути вдоль этой кривой. Принцип Ферма утверждает, что луч, соединяющий M_1 и M_2 , есть кривая, вдоль которой оптическая длина пути экстремальна. В общем случае волновой вектор \mathbf{k} (перпендикулярный поверхностям равной фазы) зависит от положения на кривой и от направления касательной к кривой. В изотропной среде, когда фазовая скорость не зависит от направления, вектор \mathbf{k} направлен по касательной к кривой, а его абсолютная величина $k = 2\pi/\lambda$ зависит только от положения на кривой и не зависит от направления распространения. Однако принцип Ферма применяется и в случае неизотропных сред.

Нетрудно видеть, что оба вариационных принципа совершенно аналогичны по форме. Чтобы лучи, соответствующие частоте ω , можно было сопоставить классическим траекториям с энергией E (условие а)), достаточно, чтобы \mathbf{k} и \mathbf{p} были пропорциональны

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{k}.$$

Константа пропорциональности α может быть найдена из условия б). Групповая скорость \mathbf{v}_g представляет собой градиент по \mathbf{k} частоты ω ; следовательно

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} E = \frac{\alpha}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{p}} E.$$

Что касается скорости частицы, то она дается формулой $\mathbf{v} = \text{grad}_{\mathbf{p}} E$. Эти две скорости равны, если $\alpha = \hbar$.

Таким образом, мы вновь получаем соотношения (5).

В случае нерелятивистской частицы в медленно меняющемся поле скалярного потенциала $V(\mathbf{r})$ волна распространяется в изотропной среде, и длина волны (см. уравнение (6)) дается выражением

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}}. \quad (7)$$

§ 5. Квантование уровней энергии атомов

Теория волн вещества позволяет просто получить условия квантования уровней энергии атомов.

Рассмотрим, для определенности, задачу об атоме водорода. Пусть мы имеем эллиптическую орбиту с энергией E . Соотноше-

ния (5) позволяют определить вектор \mathbf{k} в каждой точке орбиты. При каждом обороте фаза волны увеличивается на $\oint \mathbf{k} dr$. Чтобы волновая картина была стационарной, необходимо, чтобы это изменение фазы было равно целому числу 2π . Это дает условие квантования

$$\oint \mathbf{p} dr = \hbar \oint \mathbf{k} dr = nh \quad (n \text{ целое } > 0),$$

что можно переписать, используя обозначения первой главы, в следующем виде:

$$\oint p_r dr + \oint p_\varphi d\varphi = nh.$$

Аналогичные рассуждения позволяют получить правила квантования Бора — Зоммерфельда во всех случаях периодических и многопериодических движений.

Конечно все эти результаты имеют смысл только в приближении геометрической оптики, когда понятия длины волны и волнового вектора сохраняют свое значение. В частности, нельзя утверждать, что условия квантования сохраняют свою форму в случае малых квантовых чисел. Установленным является только факт квантования энергии, обязанный своим происхождением условию существования стационарной волны.

Для рассмотрения более общих случаев следует отказаться от приближенной теории, расширить область ее применения, как это делается в классической оптике при переходе от оптики геометрической к оптике волновой¹⁵⁾. Коль скоро мы постулировали существование волн вещества, следует найти уравнение, описывающее их распространение. Но прежде чем обратиться к этой проблеме, разберем вопрос об экспериментальных подтверждениях существования волн вещества.

§ 6. Дифракция волн вещества

Возможности экспериментальных наблюдений зависят, конечно, от длины волны, соответствующей изучаемому объекту. Когда мы имеем дело с макроскопическими предметами, длины волн столь малы, что всякие волновые эффекты практически ненаблюдаемы. Напротив, в случае объектов атомных размеров можно образовать пучки с длиной волны, сравнимой с длиной

¹⁵⁾ Отсюда и происходит название волновой механики.

волны рентгеновского излучения и, следовательно, осуществить опыты, аналогичные рентгеновской дифракции на кристаллах¹⁶⁾.

Первые опыты по дифракции волн вещества были сделаны с помощью электронов (*дифракция электронов*) Дэвисоном и Джермером (1927 г.), Г. П. Томсоном (1928 г.) и Руппом (1928 г.).

Дэвисон и Джермер изучали отражение на монокристалле и наблюдали пятна Лауэ, Г. П. Томсон и Рупп исследовали кольца Дебая — Шерера, получаемые при прохождении пучка через тонкую поликристаллическую мишень.

В этих экспериментах первоначальный пучок получался в результате ускорения электронов в электростатическом потенциале. Если E есть энергия электронов в электронвольтах, то длина волны де Бройля, измеряемая в ангстремах, равна

$$\lambda = \frac{12,2}{\sqrt{E(\text{эВ})}} \text{ \AA}.$$

В случае энергий от 1 до 100 *кэв* мы оказываемся в области обычной спектрографии кристаллов. Зная параметры кристаллической решетки, можно из наблюдаемой интерференционной картины получить экспериментальное значение длины волны электрона; это экспериментальное значение находится в прекрасном согласии с теоретическим значением де Бройля.

Аналогичные опыты по дифракции на кристаллах производились с моноэнергетическими пучками атомов гелия и молекул водорода (Стерн, 1932 г.), что дало новое подтверждение соотношениям де Бройля.

В этих опытах длина волны соответствовала движению центров тяжести каждого атома или молекулы пучка. Те же наблюдения могут быть сделаны с использованием пучков медленных нейтронов, получаемых в ядерных реакторах. Все эти опыты показывают, что волновые свойства присущи не только электронам, а являются общим явлением, характерным для всех материальных объектов.

¹⁶⁾ Рассмотрим для определенности частицу, участвующую в броуновском движении. Наименее мелкие частицы этого рода имеют диаметр порядка микрона и массу $M \approx 10^{-12}$ г. В термодинамически равновесном состоянии при обычных температурах их средняя кинетическая энергия $\frac{3}{2} kT$ равна примерно $0,4 \cdot 10^{-13}$ эрг, что соответствует средней длине волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3MkT}} \approx 5 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}.$$

При той же энергии атом гелия имеет длину волны $\lambda \approx 0,9$ А, нейтрон — $\lambda \approx 1,8$ А, а электрон — $\lambda \approx 77$ А.

§ 7. Корпускулярная структура вещества

Опираясь на аналогию между волнами вещества и классической волновой оптикой, можно задаться вопросом, нельзя ли полностью отказаться от понятия частицы вещества и заменить классическую теорию чисто волновой теорией, где волна $\psi(\mathbf{r}, t)$ играла бы роль, аналогичную роли электромагнитного поля в теории излучения.

Тогда образы корпускул, порций энергии и локализованных импульсов будут заменены образом протяженной волны с непрерывным распределением энергии и импульса. Частицы классической механики будут представлены волновыми пакетами конечной протяженности, но в достаточной степени локализованными. Мы видели, что такие пакеты следуют законам движения классических частиц в некоторых предельных случаях, когда применимо классическое приближение. Однако даже в отсутствии поля волновой пакет не может бесконечно долго сохранять это сходство с частицей, так как с течением времени он расплывается и в конечном счете может занять сколь угодно большую часть пространства (см. задачу 6)¹⁷⁾. В этих условиях вызывает удивление тот факт, что вещество столь часто проявляется в форме хорошо локализованных частиц.

Но трудности чисто волновой теории такого рода становятся еще более ясно видны, если внимательно исследовать сами эксперименты по дифракции волн вещества. Рассмотрим пучок моноэнергетических электронов, проходящий через поликристаллическую мишень; на экране, расположенном за мишенью, мы наблюдаем центральное темное пятно, соответствующее проходящей волне, которое окружено концентрическими кольцами, образованными дифрагировавшей волной. Предположим, что падающая волна есть волновой пакет $\psi(\mathbf{r}, t)$, хорошо разграниченный в пространстве; этого можно добиться, поместив (рис. 7) интенсивный источник S катодных лучей за диафрагмой D , снабженной obtюратором с фиксированным временем пропускания. Эта волна проходит через пластинку C , разделяется на проходящую и дифрагировавшую волны и, наконец, образует на экране описанную выше интерференционную картину. По предположению мы имеем дело с непрерывной протяженной волной, то же самое можно сказать об интерференционной картине. Если при прочих равных условиях уменьшать интенсивность падающей волны (например, удаляя источник S от диафрагмы D), то пропорционально должна уменьшаться интенсивность интерференционных пятен, но сами они по-прежнему должны оставаться непрерывно распределенными. Опыт полностью опровергает этот

¹⁷⁾ Исключением из общего правила является гармонический осциллятор (см. гл. VI).

вывод. Оказывается, что интерференционная картина образована большим числом отдельных дискретных точек. При уменьшении интенсивности падающей волны пропорционально уменьшается число этих точек. В пределе очень слабой интенсивности можно наблюдать до одной точки, расположенной либо на месте центрального пятна, либо же на дифракционных кольцах. Естественно приписать каждую точку воздействию прошедшего через систему одного электрона, т. е. одной частицы вещества.

Заметна полная аналогия между ситуацией, описанной здесь, и опытами по рассеянию света на решетке, обсуждавшимися в

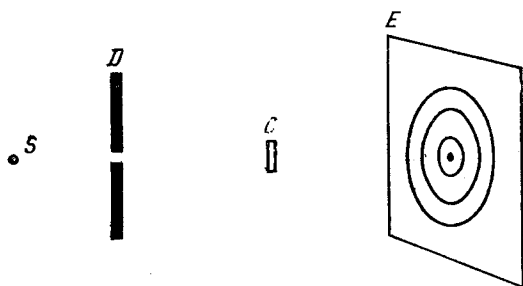


Рис. 7. Дифракция электронов на поликристаллической пластинке. Пучок электронов из источника S коллимируется диафрагмой, а затем дифрагирует на поликристаллической пластинке C . Дифракционная картина наблюдается на экране E .

первой главе. Можно продолжить эту аналогию и сделать вывод, что наиболее простое истолкование дуализма волна — частица имеет статистическую основу в том смысле, что интенсивность волны в каждой точке экрана дает вероятность попадания электрона в эту точку.

§ 8. Универсальный характер дуализма волна — частица

Из всего предшествовавшего мы делаем вывод, что микроскопические объекты обладают чрезвычайно общим свойством обнаруживать себя в двух на первый взгляд несовместимых аспектах: с одной стороны, как суперпозиция волн, с другой — как частица, т. е. локализованная порция энергии и импульса. Между этими аспектами поведения микроскопических объектов существует вполне универсальное соотношение соответствия, выражаемое формулами (5). Кроме того, связь между корпускулами и ассоциированными волнами имеет статистическую природу, которую мы уточним в дальнейшем.