

штейна, Н. Бора, В. Гейзенберга, П. Дирака, В. Паули, Э. Шредингера, М. Борна и др.

Потом последовал период углубленного физического и философского анализа основ квантовой теории, разработка ее расчетных методов, разнообразных приложений. Существенный вклад в науку здесь внесли советские ученые Л. Д. Ландау, В. А. Фок, И. Е. Тамм, Я. И. Френкель, Л. И. Мандельштам, Н. Н. Боголюбов и многие другие.

Квантовая физика достигла расцвета в современную эпоху научно-технического прогресса: осуществлен прорыв в область элементарных частиц, следующую за атомом и ядром; открыты новые явления, нашедшие широчайшее применение в науке и технике; можно назвать полупроводники, лазеры, высокотемпературную сверхпроводимость, обещающую хорошие перспективы. Фундамент же квантовой физики — квантовая механика.

В какой связи находится теоретическая физика с задачами подготовки учителя средней школы, говорилось в общем введении ко всему курсу теоретической физики (см. ч. I). Известно, что квантовая механика дает теоретические знания для преподавания в школе раздела «Квантовая физика», готовит студентов к восприятию ядерной физики и электронной теории вещества, формирует физическое миропонимание, расширяя представления о мире от макро- до микрокартин.

ГЛАВА I. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика возникла на основе изучения физических явлений, объяснение которых в рамках классических представлений оказалось невозможным. В первой главе этой книги рассматриваются наиболее существенные из этих явлений и в элементарной форме излагаются новые по отношению к классическим квантовые понятия и законы микромира.

§ 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

1.1. Проблема стабильности атомов и излучения света атомами. В начале XX в. было открыто, что атомы состоят из ядра и электронов, и была предложена планетарная модель атома. Согласно ее положениям строение самого простого атома — водородного — выглядело так: точечное ядро, масса которого почти в 2 тыс. раз больше массы электрона, вокруг ядра как вокруг неподвижного притягивающего центра обращается электрон. Он удерживается в атоме силой электростатического кулоновского притяжения. По законам

классической механики возможны устойчивые связанные состояния такой системы; они соответствуют движению по замкнутым эллиптическим орбитам. Если исходить из уравнения второго закона Ньютона, то для движущегося электрона получим равенство

$$ma_n = F,$$

или

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{\kappa e^2}{r^2}, \quad (1.1)$$

где для сокращения записи введена постоянная $\kappa = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$.

Движение электрона является ускоренным. Но согласно макроскопической электродинамике всякий ускоренно движущийся заряд излучает электромагнитные волны (см. ч. III, § 8). Полная мощность излучения определяется формулой (8.15) (см. ч. III). Используя равенство (1.1), имеем

$$N = \frac{2\kappa^3 e^6}{3c^3 m^2 r^4}.$$

Оценка по известным данным размеров атома и входящих в формулу констант ($r \sim 10^{-10}$ см) дает величину N порядка 10^{-7} Дж/с. Это огромная мощность по сравнению с запасом энергии электрона, имеющей величину порядка 10^{-13} Дж. Значит, атом за время, равное около 10^{-6} с, израсходует всю энергию на излучение, и электрон упадет на ядро.

Проблема имеет совершенно общий характер: любая классическая система, состоящая из заряженных частиц, не может находиться в статическом равновесии. А динамическое равновесие связано с движением частиц в ограниченной области пространства, которое всегда является ускоренным. Ускоренное же движение сопровождается излучением. Отсюда следует вывод о нестабильности вещества, что противоречит общеизвестным фактам: устойчивости и постоянству свойств отдельных атомов и молекул, а также состоящих из них газов, жидкостей и твердых тел.

Итак, наблюдения показывают, что атомы в невозбужденном состоянии не испускают электромагнитные волны. Излучение имеет место при переходе атома из возбужденного состояния в его основное состояние. Кроме того, с точки зрения классической механики изменение скорости движения электрона должно приводить к образованию сплошного спектра или, по крайней мере, к изменению частоты излучения. Но ко времени создания квантовой теории был накоплен огромный материал спектроскопических наблюдений, согласно которым атомы имеют строго определенные и постоянные, специфические для каждого сорта частоты излучения.

Например, для водорода все линии спектра описываются эмпирической формулой

$$\nu = R_0 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (1.2)$$

где R_0 — некоторая постоянная, а n и m принимают значения, равные числам натурального ряда, причем $m > n$.

Устойчивость атомов, а также линейчатый характер их спектров (не говоря уже о значениях конкретных частот спектральных линий) с помощью классической механики и классической электродинамики объяснить не удалось. Изучение проблемы строения атома как системы из ядра и электронов, связанных электромагнитными взаимодействиями, стимулировало поиски новых закономерностей движения в микромире, что в конечном счете и привело к созданию современной квантовой теории.

1.2. Обнаружение корпускулярных свойств света. Впервые теоретические трудности в объяснении взаимодействия света с веществом возникли еще до обсуждения планетарной модели атома, описанной выше. В конце прошлого века интенсивно исследовалось излучение абсолютно черного тела. Из термодинамических соображений следовало, что распределение интенсивности в спектре теплового излучения абсолютно черного тела не должно зависеть от его строения. Это позволяло в теоретических исследованиях использовать очень простую модель вещества: реальные атомы и молекулы заменялись системой гармонических осцилляторов, способных излучать и поглощать электромагнитные волны. Расчеты удавалось провести до конца, но согласия с экспериментальными данными не было. Более того, получался физически нелепый результат: бесконечная суммарная интенсивность излучения.

Для решения указанной проблемы М. Планк в 1900 г. выдвинул гипотезу о дискретности уровней энергии атомных систем. В частности, если предположить, что энергия осциллятора принимает следующие дискретные значения, квантуется по формуле

$$\varepsilon = nh\nu,$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$; ν — частота колебаний осциллятора, а h — некоторая постоянная, то можно вывести теоретически все известные эмпирические законы излучения черных тел. Современное значение константы: $h = 6,626176 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Эта фундаментальная константа квантовой физики носит название постоянной Планка.

Идея М. Планка была подхвачена А. Эйнштейном. В 1907 г. с ее помощью он сумел объяснить зависимость теплоемкости твердых тел от температуры. Из планковской гипотезы следовало также, что осциллятор поглощает и излучает свет порциями — квантами — величиной $h\nu$. Далее представление о квантах получило более определенный физический смысл. Эйнштейн предположил, что и свободное электромагнитное поле состоит из элементарных частиц (фотонов), энергия и импульс которых определяются формулами

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (1.3)$$

Здесь $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0545887 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — так называемая приведенная постоянная Планка; $\omega = 2\pi\nu$ — циклическая частота; \vec{k} — волно-

вой вектор, модуль которого называется волновым числом $\left(k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$, по направлению совпадающий с направлением распространения фронта волны.

Квантование электромагнитного поля позволило Эйнштейну в 1905 г. объяснить законы фотоэффекта. (Формулу Эйнштейна для фотоэффекта мы изучаем теперь в средней школе.)

Корпускулярные представления о свете скоро получили и другие экспериментальные подтверждения. В 1923 г. А. Комптон и П. Дебай использовали гипотезу о фотонах для объяснения эффекта Комптона (см. ниже). После этих работ гипотеза о квантах света прочно вошла в современную физику и в дальнейшем получила свое теоретическое обоснование в рамках квантовой электродинамики.

1.3. Эффект Комптона. Эффект Комптона состоит в изменении частоты электромагнитных волн при рассеянии их на свободных электронах. В элементарной теории этого эффекта свет рассматривается как поток частиц.

Пусть имеет место столкновение фотона с неподвижным электроном. При соударении фотон теряет часть энергии. При этом изменяются частота волны и направление ее распространения. Электрон приобретает импульс и кинетическую энергию. Применяя законы сохранения энергии и импульса, получаем равенства

$$\left. \begin{aligned} \hbar\omega_1 + mc^2 &= \hbar\omega_2 + \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \\ \vec{p}_1 &= \vec{p}_2 + \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

где \vec{v} — скорость электрона после столкновения; \vec{p}_1 и \vec{p}_2 — начальный и конечный импульсы фотона; ω_1 и ω_2 — частоты излучения до и после столкновения.

Чтобы получить связь между ω_1 и ω_2 , необходимо исключить из уравнений (1.4) скорость электрона. С этой целью совершим ряд преобразований. В итоге получаем соотношения

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{c^2} (\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 + mc^2)^2 &= \frac{m^2 c^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \\ (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 &= \frac{m^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

Вычитая из первого равенства (1.5) второе, имеем

$$\frac{1}{c^2} (\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 + mc^2)^2 - (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 = m^2 c^2. \quad (1.6)$$

Пусть Θ — угол между векторами \vec{p}_1 и \vec{p}_2 . Раскроем скобки в равенстве (1.6) и учтем, что

$$p_1 = \frac{\hbar\omega_1}{c}, \quad p_2 = \frac{\hbar\omega_2}{c}.$$

После простых выкладок находим

$$\omega_1 - \omega_2 = \frac{\hbar\omega_1\omega_2}{mc^2}(1 - \cos \Theta). \quad (1.7)$$

Поскольку $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, формула (1.7) может быть представлена в виде

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \Theta). \quad (1.8)$$

Выражение (1.8) правильно передает изменение длины волны при рассеянии рентгеновского излучения на электроне, обнаруженное А. Комптоном в опыте в 1922 г. Это убедительное свидетельство корпускулярных свойств света. Действительно, при теоретическом расчете и фотон, и электрон уподоблялись точечным объектам. Если же использовать волновые представления, то нельзя понять, почему импульс и энергия волны сосредоточиваются в одной точке, почему волна взаимодействует только с одним электроном. Волновая теория — классическая электродинамика — для свободного заряда дает ту же частоту для рассеянных волн, что и для падающих.

1.4. Открытие дискретных уровней энергии атома. Дж. Франк и Г. Герц в 1914 г. изучали столкновения электронов с атомами ртути. Было обнаружено два вида соударений: упругое, без изменения энергии электрона, и неупругое, сопровождающееся потерей строго определенного количества энергии. Отсюда следовало, что атому сообщается при столкновении всегда одна и та же порция энергии. Этот результат можно истолковать только следующим образом: неупругие столкновения соответствуют переходу между двумя дискретными энергетическими состояниями, энергия атомов изменяется дискретно. Измерение величины передаваемой энергии позволило определить разность между энергией нижнего основного и первого возбужденного состояния. Для ртути она оказалась равной 4,9 эВ. Затем были обнаружены и более высокие уровни энергии.

Дискретность значений энергии атома полностью согласуется с линейчатым характером его спектра. Пусть уровни энергии атома водорода определяются соотношениями

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}, \quad Ry = hR_0. \quad (1.9)$$

Если при переходе из одного энергетического состояния в другое испускается (поглощается) квант света с частотой

$$\nu = \frac{1}{h}(E_{n_2} - E_{n_1}),$$

то мы приходим к формуле (1.2), т. е. объясняем происхождение линейчатого спектра.

Квантование энергии микроскопической системы частиц получило надежное подтверждение и во многих других опытах. Однако само представление о дискретных уровнях энергии находится в глубоком противоречии с классической механикой. По ее законам энергия час-

тицы в силовом поле или системы взаимодействующих частиц — непрерывная величина, и нет правил, выделяющих отдельные ее значения из непрерывной их последовательности.

1.5. Полуклассическая теория Бора. В 1913 г. Н. Бор разработал первую квантовую теорию атома водорода, позволившую объяснить дискретность уровней энергии атома и вывести формулу для частот спектральных линий.

Теория Бора называется полуклассической. С одной стороны, в ней допускается использование классической механики для описания движения электрона, с другой — вводятся новые положения, противоречащие классической физике. Это квантовые постулаты Бора:

1) *Существуют стационарные состояния атома, в которых он не излучает и не поглощает энергию.*

2) *Излучение и поглощение энергии атомом происходит при скачкообразном переходе из одного стационарного состояния в другое.*

Если ϵ — излученная (поглощенная) энергия, то $\epsilon = E_{n_2} - E_{n_1}$, где n_2 и n_1 — номера квантовых состояний.

Для выделения стационарных состояний из непрерывного множества состояний движения, которые имеют место согласно классической механике, служит правило квантования момента импульса: модуль момента на стационарной орбите определяется по формуле

$$mvr = n\hbar. \quad (1.10)$$

Квантовое число n принимает значения 1, 2, 3, ...

Приведенных положений достаточно, чтобы установить радиус стационарной орбиты, энергию стационарного состояния электрона в атоме и вывести спектральную формулу (1.2). Используя выражение (1.1), вытекающее из второго закона Ньютона, и правило квантования (1.10), получаем радиус круговой стационарной орбиты:

$$r_n = an^2, \quad a = \frac{\hbar^2}{\kappa me^2} \simeq 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ м}. \quad (1.11)$$

Энергия электрона находится из соотношения

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{\kappa e^2}{r} = -\frac{\kappa e^2}{2r}.$$

Подставляя сюда значение радиуса r_n , имеем

$$E_n = -Ry \frac{1}{n^2}, \quad Ry = \frac{m\kappa^2 e^4}{2\hbar^2} \simeq 13,6 \text{ эВ}, \quad (1.11a)$$

что для частоты излучения приводит к формуле (1.2), если $R_0 = \frac{Ry}{h}$.

Далее нетрудно выразить спектроскопическую постоянную R_0 в формуле (1.2) через значения физических констант. Хорошее совпадение теоретического результата с экспериментальным ее значением (до 7...8 значащих цифр) явилось триумфом теории Бора и свидетельствовало о правоммерности ее постулатов.

Для большей точности необходимо учесть движение ядра. С этой

целью вместо массы электрона нужно использовать приведенную массу атома:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$

Эвристическое значение теории Бора состоит в смелом предположении о существовании стационарных состояний и скачкообразных переходов между ними. Эти положения позднее были распространены и на другие микросистемы. Подбирая те или иные правила квантования, удалось найти уровни энергии многих простых систем. В частности, для периодического одномерного движения Бором была предложена формула

$$\oint p(q) dq = 2\pi\hbar n. \quad (1.12)$$

Здесь q — обобщенная координата; p — обобщенный импульс, сопряженный этой координате. Интеграл берется по фазовой траектории $p(q)$ (см. ч. I, § 25, п. 2).

Теория Бора, детально разработанная А. Зоммерфельдом, получила широкое распространение в период между 1913 и 1925 гг., но ее временный переходный характер был ясен с самого начала. Противоречивость исходных положений, неспособность объяснить строение многоэлектронных атомов — все это указывало на то, что эта теория являлась недостаточно последовательной и общей. Поэтому она в дальнейшем была заменена современной квантовой механикой, основанной на более общих и непротиворечивых исходных положениях.

Сейчас известно, что постулаты Бора являются следствиями более общих квантовых законов. Но правила квантования типа (1.10), (1.12) широко используются и в наши дни как приближенные соотношения: их точность часто бывает очень высокой (см. § 6, п. 4).

1.6. Гипотеза де Бройля. Явления дифракции и интерференции света свидетельствуют о его волновой природе, в то время как фотоэффект и эффект Комптона — о корпускулярной. Приходится считаться с этой двойственностью света — его *корпускулярно-волновым дуализмом*.

В 1923 г. Л. де Бройль высказал идею, что такой *корпускулярно-волновой дуализм свойствен не только свету, но и материальным телам*. Он полагал, в частности, что свободной частице следует сопоставить плоскую монохроматическую волну, причем волновые параметры — частота ω и длина волны λ — связаны с механическими характеристиками — импульсом \vec{p} и энергией ϵ — соотношениями (1.3)

$$\omega = \frac{\epsilon}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \quad (1.13)$$

Гипотеза де Бройля получила вскоре надежное экспериментальное подтверждение. В 1923 г., наблюдая рассеяние пучка электронов на поверхности кристалла, К. Дэвиссон и Кунсман обнаружили

дифракционные максимумы. Позднее, в 1927 г., Дэвиссон и Л. Джермер подтвердили этот результат в опытах, поставленных специально для обнаружения волновых свойств электронов.

В настоящее время после многочисленных экспериментов, теоретических исследований и их практических применений хорошо известно, что любые частицы — фотоны, электроны, протоны, целые атомы и молекулы — при подходящих условиях обнаруживают волновые свойства. Но для наблюдения, например дифракции, необходимо, чтобы пучок частиц встречал на своем пути препятствия, размеры которых соизмеримы с длиной волны де Бройля, сопоставляемой отдельной частице в соответствии с формулами (1.13). Существуют также явления, обусловленные интерференцией волн де Бройля.

Известно, что интерференция и дифракция свойственны только волновым процессам и не могут иметь место при движении и взаимодействии корпускул — материальных точек классической механики. Следовательно, микрочастицы проявляют волновые свойства.

Гипотеза де Бройля ничего не говорит о природе «волн материи». Как будет показано далее, волны де Бройля нельзя рассматривать как волны в какой-то материальной среде. Их физический смысл еще предстоит выяснить.

1.7. Корпускулярно-волновой дуализм. Вспомним две основные модели материальных объектов, применяющиеся в классической механике и электродинамике.

При изучении движения материальной точкой заменяют тела, размеры которых можно пренебречь по сравнению с расстояниями между ними. В каждый момент времени t материальная точка находится в определенной точке пространства с координатами x, y, z . Движение ее описывается кинематическим уравнением

$$\vec{r} = \vec{r}(t) \quad (1.14)$$

и происходит по определенной траектории. В каждой точке траектории может быть определена скорость:

$$\vec{v} = \dot{\vec{r}}(t).$$

Кроме тел, классическая физика имеет дело с полями. Например, электромагнитное поле — это вид материи, непрерывно распределенной в пространстве. Поле задается с помощью некоторых характеристик в каждой его точке в каждый момент времени. Они называются полевыми величинами. Основными полевыми величинами для электромагнитного поля служат напряженность электрического поля: $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t)$ — и индукция магнитного поля: $\vec{B} = \vec{B}(\vec{r}, t)$.

Движение поля — это изменение его характеристик с течением времени в каждой точке пространства. В этом отношении весьма характерен волновой характер изменения поля. В конечном счете любые волны сводятся к набору простейших — плоских монохроматических волн:

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}. \quad (1.15)$$

Сопоставляя материальную точку и волновое поле, следует сопоставлять уравнение (1.14) с выражением (1.15). В известной мере две рассмотренные сейчас модели материи — точка и волна — обладают исключаящими друг друга свойствами. Так, точка — объект локальный: в ней сосредоточены масса тела, энергия, импульс, заряд (если тело заряжено). Волна же непрерывно распределена в пространстве (плоская волна занимает все бесконечное пространство). Непрерывно распределены в волновом поле энергия и импульс. Если движение материальной точки исчерпывающе описывается траекторией и скоростью, то для волны можно указать движение фронта, потоки энергии и импульса, но о траектории в общем случае речь не идет.

Таким образом, для описания того или иного материального объекта должен быть сделан альтернативный выбор: один и тот же объект не может описываться моделью материальной точки и волны.

Однако корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц налицо как совокупность экспериментальных фактов. С одной стороны, электроны, протоны, ядра веществ и другие микрообъекты имеют очень малые размеры, т. е. масса, импульс, энергия, электрический заряд у них локализованы в малых областях пространства. Поэтому по сравнению с расстояниями между частицами последние во многих случаях принимаются за точечные. С другой стороны, при взаимодействии между собой и с макротелами микрочастицы ведут себя как волны (наблюдаются дифракция, интерференция). Это значит, что микрочастицы не могут моделироваться материальными точками, движущимися по определенным траекториям, и не могут моделироваться волнами с непрерывно распределенными в пространстве энергией и импульсом.

Для описания движения микрочастиц и их взаимодействия между собой и с макротелами с помощью математических средств необходим некий синтез их корпускулярных и волновых свойств. Он достигается в истолковании природы волн, соответствующих микрочастицам. Как уже указывалось, это не волны материальной среды. Согласно идее, высказанной в 1926 г. М. Борном, квадрат модуля функции $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, описывающей «волны материи», в общем случае пропорционален вероятности обнаружения частицы в точке пространства \vec{r} в момент времени t . Эта интерпретация волн, описывающих движение и взаимодействие микрочастиц, сейчас является общепринятой.

Заключая краткий обзор экспериментов и теоретических положений, исторически предваряющих квантовую механику, заметим, что мы обсудили лишь некоторые моменты на пути ее создания, позволяющих в какой-то степени обозреть весь путь. Фактически вся совокупность важнейших открытий в физике конца XIX — начала XX в. есть экспериментальное основание квантовой теории (о структуре теории см. введение, ч. I). Это открытие электрона и явления радиоактивности, рентгеновских лучей, спина электрона и др. Теоретическое обобщение — формирование ядра теории в ее современном виде — было сделано Э. Шредингером и В. Гейзенбергом в 1926—

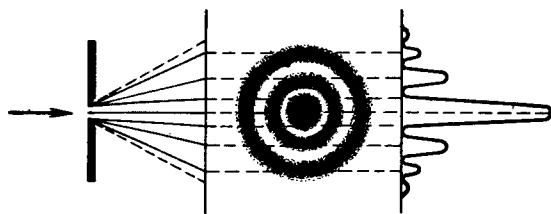


Рис. 1.1.

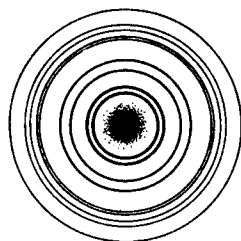


Рис. 1. 2. Дифракция пучка электронов на тонкой поликристаллической серебряной пластинке.

1927 г. Помимо них крупный вклад в разработку теории внесли В. Паули, П. Дирак и еще большая группа физиков разных стран. В эту группу, в частности, входят советские ученые В. А. Фок и Л. Д. Ландау.

§ 2. ФУНКЦИЯ СОСТОЯНИЯ

2.1. Необходимость вероятностно-статистической интерпретации волн де Бройля. Продолжим обсуждение волновых свойств микро-частиц. Как показывает опыт, можно наблюдать дифракцию электронов при отражении пучка этих частиц от кристалла. Однако при выяснении принципиальных особенностей поведения частиц нет необходимости изучать это сложное явление во всех его деталях и подробностях. Можно остановиться на дифракционной решетке более простого типа или даже ограничиться исследованием прохождения электронов через одно отверстие в диафрагме. Правда, такой опыт нельзя поставить в действительности. Но если мы будем при теоретическом анализе некоторой физической ситуации исходить только из твердо установленных закономерностей, то наши выводы не разойдутся с истиной. Мысленные эксперименты широко используются в физике. Как правило, они представляют собой весьма идеализированные схемы настоящих опытов. Это позволяет освободиться от несущественных моментов и сосредоточить внимание на главном — на том, что требуется изучить в первую очередь.

Итак, допустим, что пучок частиц падает на диафрагму с маленьким круглым отверстием посередине. Для определенности будем говорить об электронах. За диафрагмой и параллельно ей поставим экран (рис. 1.1). Опираясь на гипотезу де Бройля, можно предсказать, что произойдет, если электроны пройдут через отверстие. Предположим, что размеры отверстия соизмеримы с длиной волны де Бройля. Тогда должна наблюдаться дифракция волн. Если вместо экрана установить фотопластинку, то, выждав нужное для экспозиции время, мы получим дифракционную картину в виде темного круглого центрального пятна и бледных концентрических колец вокруг него. Реальные опыты по дифракции электронов при прохождении через тонкую поликристаллическую фольгу дают