

на в атоме на соответствующей орбите и оболочку K заполняют два электрона. Для $n = 2$ число различных состояний равно восьми и, действительно, вторую L -оболочку заполняет восемь электронов и т. д.

Введение четырех квантовых чисел, установление принципа Паули и объяснение периодической системы Менделеева — новые большие успехи теории атома Бора. Однако они по-прежнему не означали, что теорию можно считать удовлетворительной. Во-первых, сами постулаты Бора имели характер непонятных, ниоткуда не следуемых утверждений, которые должны были бы получить свое обоснование. Во-вторых, помимо основных постулатов теория содержала ряд других принципов: условия квантования, принцип соответствия, принцип Паули

и т. д. Все они также нуждались в обосновании. Наконец, теория дала многое для выяснения строения атома и атомных спектров и т. д., однако ее применение часто встречало непреодолимые трудности уже в довольно простых случаях. Так, никакие попытки теоретически рас也算ать даже такой, казалось бы, простой атом, как атом гелия, не привели к успеху. Неудовлетворительность теории атома ясно понималась самими физиками. Так, например, Паули в одном из своих писем в 1925 г. писал:

«Физика теперь снова зашла в тупик, во всяком случае для меня она слишком трудна, и я предпочел бы быть комиком в кино или кем-нибудь вроде этого и не слышать ничего о физике»¹⁾.

Таким образом, перед физикой стояла задача нахождения новых путей развития теории атомных явлений. Эти пути потребовали отказа от целого ряда понятий и давно установленных принципов. Молодой немецкий ученый Гейзенберг установил основы так называемой матричной механики; французский физик де Бройль, а за ним австрийский физик Шредингер разработали волновую механику. Как вскоре оказалось, и матричная механика, и волновая механика — различные формы общей теории, получившей название квантовой механики.

§ 70. РАЗВИТИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

К созданию матричной механики — одной из форм квантовой механики на первом этапе ее развития — Гейзенберг (1901—1975) пришел в результате исследований спектральных закономерностей, а также теории дисперсии.

¹⁾ Теоретическая физика XX века М. Ил., 1962, с. 34.



Вerner Гейзенберг

Классическая теория дисперсии основывалась на представлении, что вещество состоит из электрических осцилляторов, способных поляризоваться и приходить в колебательное движение под влиянием электромагнитных волн. Пусть собственная частота электрического осциллятора равна ν_0 и на него падает монохроматическая электромагнитная волна $E_0 e^{2\pi\nu t}$. Тогда этот осциллятор, если предположить, что заряд равен заряду электрона, приобретает переменный электрический момент, амплитуда которого без учета затухания равна

$$p_0 = \frac{e^2 E_0}{4\pi^2 m (\nu_0^2 - \nu^2)}.$$

Если в единице объема содержится N осцилляторов, то простой подсчет позволяет определить диэлектрическую проницаемость вещества, а значит, и показатель преломления n . Для прозрачной области

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{\pi m} \frac{N}{\nu_0^2 - \nu^2}.$$

Принимая во внимание, что осцилляторы могут иметь различные собственные частоты ν_1, ν_2, \dots , формулу нужно записать в виде

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{\pi m} \sum_i \frac{N_i}{\nu_i^2 - \nu^2}.$$

Последняя формула в основном хорошо выражала зависимость показателя преломления от частоты ν в области нормальной дисперсии.

Конечно, в классической теории дисперсии оставались неясные моменты. В частности, это вопрос о числе осцилляторов N_1, N_2, \dots , которые, как показывали измерения, нельзя было просто отождествить с общим числом электронов в атоме, полагая, что каждый из них является гармоническим осциллятором. Поэтому было введено понятие «дисперсионных электронов», т. е. электронов, участвующих в процессах дисперсии. Появление и развитие теории Бора заставили по-новому взглянуть на процессы поглощения, дисперсии и рассеяния света атомами. По Бору, уже не электрон в атоме является одним из осцилляторов, который при возбуждении совершает колебания с определенной частотой, а каждый из них способен возбуждаться и излучать разные частоты, переходя из возбужденных состояний в невозбужденное. Таким образом, с точки зрения Бора механизм взаимодействия света с веществом, механизм излучения, дисперсии, рассеяния света совсем иной, нежели тот, который представлялся в классической физике.

Как же построить теорию излучения, дисперсии и рассеяния света по Бору? Для решения этой задачи был опять же использован принцип соответствия, т. е. проведена аналогия между классическим и квантовым рассмотрениями взаимодействия света с веществом. Применяя принцип соответствия, нужно классическим осцилляторам (дисперсионным электронам), имеющим собственные частоты колебаний $\nu_1,$

ν_2, \dots , поставить в соответствие атом как набор осцилляторов с частотами, определяемыми по теории Бора соотношением

$$\nu = (E_m - E_n)/\hbar.$$

Что же касается числа дисперсионных электронов N_1, N_2, N_3, \dots , то всем им нужно сопоставить величины, определяемые вероятностями переходов атома из одного состояния в другое, при котором излучается или поглощается соответствующая частота. Эти вероятности были введены Эйнштейном еще в 1917 г.¹⁾ при выводе закона черного излучения Планка (коэффициенты Эйнштейна).

В этом направлении и развивалась квантовая теория дисперсии, начиная с работы Ладенбурга, относящейся к 1921 г.²⁾ Квантовая теория дисперсии приводит к следующей формуле для показателя преломления:

$$n^2 = 1 + \frac{c^3 N}{8\pi^3} \sum_i \frac{A_i^1}{\nu_i^2 (\nu_i^2 - \nu^2)},$$

где N — число атомов в единице объема; A_i^1 — коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения, соответствующего переходу с высшего энергетического уровня на низший уровень 1 с излучением частоты ν_i . Эта формула отличается от классической. Однако если ввести величину

$$f_i = A_i^1 \frac{c^3 m}{8\pi^2 \nu_i^2 e^2},$$

названную «силой осциллятора», то формула принимает классический вид

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{\pi m} \sum_i \frac{N f_i}{\nu_i^2 - \nu^2},$$

только здесь вместо числа гармонических осцилляторов N_i стоит выражение $N f_i$. Это и есть число дисперсионных электронов.

В 1924 г. Крамерс указал на то, что в теории дисперсии нужно принять во внимание, что атомы без влияния внешнего электромагнитного излучения могут находиться в возбужденном состоянии, например в состоянии k . Поэтому нужно учитывать переходы в состояние k как из высших состояний i , так и из низших состояний j . В этом случае формула дисперсии принимает вид

$$n^2 = 1 + \frac{e^2 N}{\pi m} \left[\sum_{i>k} \frac{f_{ik}}{\nu_{ik}^2 - \nu^2} - \sum_{i< k} \frac{f_{kj}}{\nu_{kj}^2 - \nu^2} \right],$$

1) Эйнштейн А. Собрание научных трудов. Т. III, с. 393.

2) Zeitschr. f. Phys., 4, 1921, S. 451.

где $v_{ik} = (E_i - E_k)/\hbar$ и $v_{kj} = (E_k - E_j)/\hbar$, f_{ik} и f_{kj} — соответствующие силы осцилляторов.

Предположения Крамерса оправдались. Через несколько лет было обнаружено явление отрицательной дисперсии при прохождении света через положительный столб газового разряда.

Квантовая теория дисперсии, развитая на основании теории Бора, уже не опиралась на модельные представления о строении атома. Если и можно говорить о модели атома в этой теории, то только лишь как о символической математической модели. В этой модели атом представлялся как совокупность виртуальных гармонических осцилляторов $q_{ij} = a_{ij} e^{2\pi i \omega_{ij} t}$, названная Ланде «виртуальным оркестром»¹⁾.

Представления же об атоме как о системе, состоящей из ядра и вращающихся вокруг него электронов, которые обладают определенной массой, движутся с определенной скоростью по определенной траектории, нужно понимать лишь как аналогию для установления соответствующей математической модели. При этом особую роль играл принцип соответствия как принцип аналогии между классическим и квантовым рассмотрениями²⁾.

Указанный метод исследования развел Гейзенберг в 1926 г., распространив его вообще на теорию атомных явлений. Еще в 1923 г. Гейзенберг принял точку зрения, согласно которой «модельные представления принципиально имеют только символический смысл, они являются классическими аналогами «дискретной» квантовой теории»³⁾. Именно таким путем Гейзенберг рассчитывал преодолеть трудности, возникшие перед полуклассической теорией Бора. В работе 1926 г.⁴⁾ Гейзенберг, впервые высказывая основные положения квантовой механики в матричной форме, развил приведенную выше мысль. Теория атомных явлений, по Гейзенбергу, должна ограничиваться установлением соотношений между величинами, которые непосредственно измеряются в экспериментальных исследованиях («наблюдаемыми» величинами, по терминологии Гейзенберга) — частотой излучения спектральных линий, их интенсивностью, поляризацией и т. п. «Ненаблюдаемые» же величины, такие, как координаты электрона, его скорость, траектория, по которой он движется, и т. д., не должны использоваться в теории атома. Однако в согласии с принципом соответствия новая теория должна определенным образом соответствовать классическим теориям. Конкретно это должно выражаться в том, что соотношения новой теории должны находиться в отношении аналогии с соотношениями классических величин. При этом каждой классической величине нужно найти соответствующую ей квантовую величину и, пользуясь классическими соотношениями, составить соответствующие им соотношения между найденными квантовыми вели-

1) Naturwiss., 14, 1926, S. 455.

2) Такой метод исследования был назван Борном в 1924 г. квантовомеханическим (Zeitschr. f. Phys., 26, 1924, S. 379).

3) Г е й з е н б е р г В. Воспоминания об эпохе развития квантовой механики.— В кн.: Теоретическая физика XX века, с. 54.

4) Heisenberg W. Zeitschr. f. Phys., B. 33, 1925, S. 879.

чинами. Позднее в своей работе «Физические принципы квантовой теории» Гейзенберг писал:

«Для вывода математической схемы квантовой теории (это относится как к корпускулярному, так и к волновому представлению) мы имеем в распоряжении два источника: эмпирические факты и принцип соответствия. Боровский принцип соответствия в своей наиболее общей формулировке гласит, что между квантовой теорией и соответствующей данной примененной картине классической теории существует качественная аналогия, которая может быть проведена до деталей. Эта аналогия не только дает указания для нахождения формальных законов, ее особенное значение заключается главным образом в том, что она одновременно дает и физическую интерпретацию найденных законов»¹⁾.

Используя этот принцип, Гейзенберг и строит новую теорию. Одними из самых основных величин, характеризующих состояние частицы в классической механике, являются прежде всего ее координаты как функции времени, например координата $x(t)$. В квантовой механике понятие координаты теряет смысл:

«Электрону, — пишет Гейзенберг, — нельзя сопоставить с помощью наблюдаемых величин некоторую точку пространства, являющуюся функцией времени»²⁾.

Вопрос, какую величину, образованную из «наблюдаемых», нужно сопоставить в квантовой механике координате $x(t)$, Гейзенберг решает следующим образом. В классической физике для случая одной степени свободы координату материальной точки, если она совершает периодическое движение, можно представить в виде ряда Фурье:

$$x(t) = \sum_{a=-\infty}^{+\infty} a_a e^{i\omega a t}.$$

С другой стороны, атом в теории дисперсии представляется как совокупность гармонических осцилляторов:

$$q_{nm} = a_{nm} e^{i\omega(n, m)t}.$$

Таким образом, в классической координате частицы нужно поставить в соответствие в квантовой механике совокупность величин $q_{nm} = a_{nm} e^{i\omega(n, m)t}$, где $\omega(n, m)$ — одна из возможных частот, излучаемых или поглощаемых частицей при переходе из состояния с энергией E_n в состояние с энергией E_m так, что согласно постулату Бора

$$\omega_{nm} = 2\pi \frac{E_n - E_m}{h}.$$

Амплитуда a_{nm} связана с вероятностью такого перехода, и значение $|a_{nm}|$ определяет интенсивность излучаемого при этом электромагнитного излучения частоты ω_{nm} .

Если классической координате $x(t)$ соответствуют в квантовой механике совокупность осцилляторов $q_{nm} = a_{nm} e^{i\omega(n, m)t}$, то какая же квантовая величина соответствует классической величине $x^2(t)$? Величину

1) Г е й з е н б е р г В. Физические принципы квантовой теории. М.—Л., Гостехиздат, 1932, с. 80.

2) Zeitschr. f. Phys. B. 33, 1925, S. 881.

$x^2(t)$ можно опять-таки представить в виде ряда, воспользовавшись разложением в ряд $x(t)$, а именно:

$$x^2(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_k e^{i\omega kt} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} a_l e^{i\omega lt} = \sum_{a=-\infty}^{+\infty} b_a e^{i\omega at},$$

$$\text{где } b_a = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_k a_{a-k}.$$

Такое представление $x^2(t)$ позволяет Гейзенбергу сопоставить этой величине опять-таки совокупность гармонических осцилляторов

$$q_{nm}^2 = b_{nm} e^{i\omega(n, m)t},$$

$$\text{где } b_{nm} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_{nk} a_{km}.$$

Рассуждая аналогично, можно определить квантовые величины, соответствующие классическим величинам $x^3(t)$, $x^4(t)$, ... и т. д. Следовательно, и для любой функции $f(x(t))$, допускающей разложение в ряд по степеням x , можно найти квантовые величины — совокупности соответствующих осцилляторов.

Далее можно образовать квантовые аналогии для величин $x(t)$, $\dot{x}(t)$ и т. д. За квантовый аналог для $\dot{x}(t)$ принимается совокупность осцилляторов

$$\dot{q}_{nm} = i\omega(n, m) a_{nm} e^{i\omega(n, m)t} \text{ и т. д.}$$

Проводя соответствие между квантовым и классическим рассмотрениями атомных явлений, нужно допустить, что между квантовыми величинами существуют соотношения, аналогичные имеющим место между соответствующими классическими величинами. Рассмотрим, например, периодическое движение частицы, имеющей одну степень свободы. В классической физике уравнение движения имеет вид

$$\ddot{x} + f(x) = 0,$$

интегрируя которое с учетом начальных значений получаем решение данной задачи.

В квантовой механике этому уравнению нужно сопоставить аналогичное соотношение между квантовыми величинами. При этом $f(x)$ следует разложить в степенной ряд. Но в квантовой механике не имеет смысла говорить о начальных значениях соответствующих величин. Зато в случае периодического движения должно выполняться еще условие квантования

$$\oint pdq = nh,$$

где p и q — классические величины (импульс и координата), n — целое число.

Этому полуклассическому, полукvantовому условию нужно найти квантовый аналог. Гейзенберг поступает следующим образом. Для простейшего случая одной степени свободы условие квантования для

периодического движения можно записать так:

$$\oint pdq = \oint m\dot{x}dx = \oint m(\dot{x})^2 dt = nh.$$

Воспользовавшись разложением

$$x(t) = \sum_{a=-\infty}^{+\infty} a_a e^{i\omega_a t},$$

определим $\dot{x}(t)$, затем $[\dot{x}(t)]^2$ и, наконец, подставим выражение для $[\dot{x}(t)]^2$ в условие квантования и проинтегрируем. В результате получаем условие квантования в преобразованном виде:

$$2\pi m \sum_{a=-\infty}^{+\infty} \omega(n) a^2 |a_a(n)|^2 = nh.$$

В этом выражении присутствуют только «наблюдаемые» величины. Далее Гейзенберг, пользуясь принципом соответствия, рассматривая $a_a(n)$ и $\omega(n)$ как функции n , полагает

$$\frac{d}{dn}(nh) = 2\pi m \sum_{a=-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dn} \{\omega(n) a^2 |a(n)|^2\}.$$

Далее, исходя из ряда соображений, используя теорию дисперсии¹⁾, Гейзенберг приходит к окончательному выражению для квантового аналога условия квантования:

$$h = 4\pi m \sum_{a=0}^{+\infty} \{|a(n, n+a)|^2 \omega(n, n+a) - |a(n, n-a)|^2 \omega(n, n-a)\}.$$

После установления квантового аналога условия квантования Гейзенберг рассмотрел простую задачу ангармонического осциллятора

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^2 = 0.$$

Заменяя в уравнениях движения классические величины x , x^2 , \dot{x} их квантовыми аналогами и используя квантовый аналог условия квантования, Гейзенберг получил уравнения, позволяющие определить значения ω_{nm} и a_{nm} , т. е. излучаемые частоты и их интенсивности.

В том же 1925 г. немецкие физики Борн и Иордан²⁾ придали идеям Гейзенberга более строгую математическую форму. Они показали, что те величины, которые Гейзенберг поставил в соответствие классическим величинам, являются матрицами, и с математической точки зрения переход от классической или полуклассической теории к кван-

1) Гейзенберг использует так называемую георему о суммах, доказанную в теории дисперсии Томасом и Куном. По этой геореме, $\sum f_{nm} - \sum f_{mn} = 1$, где f_{nm} и f_{mn} — силы осциллятора. Если заменить f_{nm} и f_{mn} их выражениями через частоты и амплитуды «дисперсионных электронов» или «виртуальных осцилляторов», то после преобразования можно получить соотношение Гейзенберга.

2) Zeitschr. f. Phys., B. 34, 1925, S. 858.

товой механике заключается в замене обычных величин и действий над ними матрицами и соответствующими действиями над последними. Основными являются матрица координат \mathbf{q} и матрица импульса \mathbf{p} с элементами $q(n, m) e^{2\pi i \nu(nm)t}$ и $p(n, m) e^{2\pi i \nu(nm)t}$. Из этих матриц можно образовать матрицы других физических величин и соответствующих соотношений между матрицами, являющимися аналогами классических соотношений. Так, например, можно составить матрицу, соответствующую энергии или гамильтониану:

$$H = \frac{1}{2} p^2 + U(q).$$

Между матрицами справедливы соотношения, соответствующие уравнениям движения, в частности каноническим уравнениям Гамильтона:

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \text{ и т. д.}$$

Матрицы, изображающие физические величины, должны быть эрмитовыми, т. е. такими, элементы которых удовлетворяют условию $q_{nm} = q_{mn}^*$, где знак « $*$ » означает переход к комплексно-сопряженной величине.

Наконец, Борн и Иордан показали также, как в матричной форме следует записать условие квантования. Это условие, называемое перестановочным соотношением, имеет вид

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{I},$$

где \mathbf{I} — единичная матрица.

В последующей работе совместно с Гейзенбергом Борн и Иордан ¹⁾ развиваются математический аппарат матричной механики, применив его для решения ряда задач.

Независимо от перечисленных выше авторов английский физик Поль Антуан Морис Дирак (1902), познакомившись с теорией Гейзенберга, разработал для новой теории несколько иной математический аппарат ²⁾. Дирак вводит в квантовую механику вместо матриц линейные дифференциальные операторы, первоначально назвав их q -числами ³⁾. Наиболее интересно применение Дираком квантовых скобок Пуассона. Он показал, что классическим скобкам Пуассона $[f_1, f_2]$ следует сопоставить квантовые скобки Пуассона, а именно:

$$[A, B] = \frac{2\pi i}{\hbar} (AB - BA),$$

где A и B — операторы, соответствующие классическим величинам f_1 и f_2 , которые являются функциями канонических переменных.

¹⁾ Вогн M., Heisenberg W., Jordan P. Zeitschr. f. Phys., B. 35, 1926, S. 557.

²⁾ Dirac P. A. M. Proc. Roy. soc. (A). Vol. 109, 1925, p. 642; Vol. 110, 1926, p. 561.

³⁾ Необходимость введения операторов в квантовую механику подчеркивал Н. Винер в 1926 г. (Wiener N. Zeitschr. f. Phys., 36, 1926, S. 174).

Если в качестве функции f_2 взять функцию H Гамильтона, зависящую от p и q , то скобки Пуассона определяют изменение какой-либо механической величины $f(q, p, t)$ со временем:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [H, f];$$

если f — интеграл движения, то

$$\frac{df}{dt} + [f, H] = 0.$$

Аналогичное соотношение существует и в квантовой механике. Так, например, можно записать выражение

$$\dot{X} + [X, H] = 0 \text{ или } \dot{X} = [H, X], \text{ а также } \dot{p} = [H, p] \text{ и т. д.}$$

Дирак показал, как, используя квантовые скобки Пуассона, можно получить перестановочные соотношения:

$$q_n q_m - q_m q_n = 0,$$

$$p_n p_m - p_m p_n = 0,$$

$$q_n p_m - p_m q_n = \delta_{nm} \frac{i\hbar}{2\pi} I$$

Рассмотрим теперь направление в развитии теории атома, основанное на других принципах, нежели те, на которые опирались Гейзенберг, Борн, Дирак и др. Это направление начало развиваться в работах французского физика Луи де Бройля (1892), первые из которых были опубликованы в 1923 г.¹⁾ В них была высказана идея о волновой природе материальных частиц. Дальнейшее развитие эта идея получила в последующих работах де Бройля и, в частности, в его докторской диссертации, защищенной в Сорbonne в 1924 г.²⁾

На основании уже установленного факта наличия у света одновременно и корпускулярных и волновых свойств, а также оптико-механической аналогии у де Бройля возникла идея о существовании волновых свойств у частиц. Вспоминая о размышлениях, которые привели его к представлению о «волнах материи», де Бройль писал:

«В оптике пришлось ввести понятие частицы наряду с понятием волны. Казалось, что природа света обладает странной «двойственностью».

Но если в теории света в течение целого столетия слишком пренебрегали понятием «частицы» для того, чтобы пользоваться исключительно понятием «волны», не была ли допущена обратная ошибка в теории материи? Были ли вправе физики пренебречь понятием «волны» и думать только о понятии «частицы»? Эти вопросы несколько лет тому назад задал себе автор, обдумывая аналогию между принципом наименьшего действия и принципом Ферма и ища смысл таинственных квантовых условий, введенных во внутриатомную динамику Планком, Бором, Вильсоном и Зоммерфельдом»³⁾.

1) С. г. Acad. Sci. Vol. 177, 1923, pp. 517, 548, 630. См. также перевод этих работ в УФН, 93, 1927, с. 178, 180, 182.

2) См. список работ де Бройля в кн.: Луи де Бройль. По тропам науки. М., ИЛ, 1962, с. 371.

3) Луи де Бройль. Введение в волновую механику. Киев, Гос. науч.-техн. изд-во Украины, 1934, с. 8.



Луи де Б्रойль

Основные идеи де Б्रойля, высказанные им в его работах, сводятся к следующему. Так же как фотон, материальные частицы обладают корпускулярными и волновыми свойствами. Со всякой покоящейся материальной частицей связан периодический процесс с частотой ν_0 , которая определяется из соотношения Планка $\hbar\nu_0 = E$, где E — энергия частицы. С другой стороны, из соотношения Эйнштейна следует, что эта энергия связана с массой уравнением $E = m_0 c^2$, где m_0 — масса покоя. Из этих двух выражений получаем

$$\nu_0 = \frac{1}{\hbar} m_0 c^2.$$

Колебательный процесс, связанный с частицей, можно записать также в виде

$$\varphi = \sin 2\pi \nu_0 t_0,$$

где ν_0 и t_0 — величины, определяемые в той системе отсчета, где частица покоятся.

Если теперь перейти к системе отсчета, которую будем считать неподвижной и в которой частица движется со скоростью v , то, применяя формулу преобразования для времени

$$t_0 = \frac{t - \beta \frac{x}{c}}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

получаем

$$\varphi = \sin 2\pi \nu_0 \frac{t - \beta \frac{x}{c}}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Это выражение описывает распространяющуюся вдоль оси x волну с частотой ν и скоростью u , причем

$$\nu = \frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad u = \frac{c^2}{v}.$$

Легко показать, что групповая скорость этой волны равна скорости частицы v .

Для длины волны λ получаем выражение

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{c^2/v}{\nu_0 / \sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{c^2/v}{1 / \frac{m_0 c^2}{\hbar \sqrt{1 - \beta^2}}} = \frac{\hbar}{v \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}} = \frac{\hbar}{mv},$$

т. е. известное соотношение де Б्रойля.

Полученные для свободной частицы результаты де Бройль считает возможным распространить и на более общий случай движения частицы с переменной скоростью, т. е. на частицу, находящуюся в силовом поле. Такую возможность он видит в существовании оптико-механической аналогии, аналогии между принципом Ферма в оптике и принципом Мопертюи в механике.

Запишем выражение для принципа Ферма применительно к фазовой волне:

$$\delta \int \frac{ds}{\lambda} = \delta \int \frac{uds}{u} = \delta \int \frac{1}{h} \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \frac{\theta}{c^2} ds = \\ = \frac{1}{h} \delta \int m v ds = \frac{1}{h} \delta \int p ds = 0,$$

или

$$\delta \int p ds = 0.$$

Теория де Бройля объясняет квантовые условия устойчивости круговых орбит, установленные Бором. Движение электрона по круговой орбите устойчиво только тогда, когда длина фазовой волны укладывается целое число раз на окружности, описываемой электроном, т. е. когда $n\lambda = 2\pi r$, где n — целое число. Для данного случая $\lambda = h/(mv) = h/(m\omega r)$, и мы получим

$$nh = 2\pi m \omega r^2, \text{ или } m \omega r^2 = n \frac{h}{2\pi}$$

т. е. условие устойчивости орбит Бора. Иначе, орбита устойчива в том случае, когда $\delta ds/\lambda = n$, т. е. целому числу. Это условие, если учесть соотношение $\lambda = h/p$, установленное де Бройлем, сейчас же переходит в известное квантовое условие.

Введя представление о волнах, связанных с движущейся частицей (они получили название волн де Бройля или волн материи), де Бройль не дает определенного ответа на вопрос, что представляют собой эти волны, какова их природа? Он только подчеркивает, что это не обычные материальные волны, несущие энергию. Это следует из того, что их скорость больше скорости света, следовательно, их распространение не может быть распространением энергии того или иного вида. Де Бройль называет эти волны «фазовыми волнами» и пишет, что

«Я нарочно дал довольно неогчетливые определения фазовой волны и первоначального явления, которое она, так же как и квант снега, некоторым образом выражает. Настоящую теорию нужно, таким образом, рассматривать скорее как форму, физическое содержание которой не вполне установлено, чем как окончательно разработанную стройную теорию»¹⁾.

Первые работы де Бройля, в которых высказывалась идея волн, связанных с материальными частицами, не обратили на себя серьезного внимания со стороны большинства физиков-теоретиков. Де Бройль

¹⁾ Л. де Бройль. Исследование по теории кванта.— В кн.: Вариации на тему принципы механики, с. 667.



Эрвин Шредингер

впоследствии писал, что идеи, которые он высказал, были приняты с «удивлением, к которому несомненно примешивалась какая-то доля скептицизма»¹⁾. И действительно, на теоретиков, занимавшихся атомной физикой (Бора, Гейзенберга, Дирака, Борна и др.), они не произвели положительного впечатления. Интерес к идеям де Бройля проявил Эйнштейн, который хотя и назвал диссертацию де Бройля книгой, написанной как будто сумасшедшим, тем не менее она заинтересовала его. В частности, он уже в 1925 г. использовал результаты теории де Бройля в статической физике при построении статистик Бозе—Эйнштейна²⁾. Особено сильное влияние идеи де Бройля оказали на австрийского физика Эрвина Шредингера (1887—1961), который увидел в них источник для создания новой атомной механики. В 1926 г.

последовали работы Шредингера, в которых он, развивая идеи де Бройля, построил так называемую волновую механику. В первом сообщении³⁾ Шредингера постановка вопроса носит довольно формальный характер. Он хочет заменить непонятные постулаты Бора о дискретных состояниях атома и правила квантования некоторыми положениями, в которых целочисленность получается естественным образом сама собой подобно тому, как сама по себе получается целочисленность числа узлов при рассмотрении колеблющейся струны. Исходя из уравнения Гамильтона—Якоби $H\left(q, -\frac{\partial S}{\partial q}\right) = E$, заменяя функцию S через $S = k \ln \psi$, где $k = \hbar/2\pi$, и рассматривая некоторую вариационную задачу, он получает для атома водорода уравнение

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0.$$

Оказывается, что это уравнение для случая $E < 0$ имеет конечные, непрерывные и равные нулю на бесконечности решения только при определенных значениях $E_n = -2\pi^2 me^4/(hn)^2$, где n — любое целое положительное число, большее нуля. Таким образом, автоматически получается хорошо известное выражение для энергии дозволенных

1) Л. де Бройль. Останется ли квантовая физика индетерминистической?— В кн.: Вопросы причинности в квантовой механике. М., ИЛ, 1955, с. 17.

2) Эйнштейн А. Собрание научных трудов. Т. III, с. 496.

3) Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. М., «Наука», 1976, с. 9.

орбит, найденное Бором на основе выдвинутых им постулатов.

Обсуждая полученные результаты, Шредингер подчеркивает, что пришел к ним под влиянием исследований де Бройля. Он указывает, что функция ψ естественным образом связана с неким колебательным процессом в атоме. Но, прежде чем основываться на конкретном представлении об этом волновом процессе, он решил сначала избрать чисто математический способ, так как он дает возможность лучше выяснить все существенные стороны вопроса. В следующем сообщении¹⁾ Шредингер уже не ограничивается формальной постановкой вопроса, а приводит рассуждения, оправдывающие полученное им уравнение. При этом он исходит из оптико-механической аналогии Гамильтона.

В классической механике задача движения механической системы сводится к решению уравнения Гамильтона—Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = 0,$$

где $S = \int_0^t (T - U) dt$ — действие, которое является функцией координат и времени.

Если система консервативна, то

$$S(q_i, t) = S_0(q_i) - Et.$$

Тогда, подставив выражение для S в уравнение Гамильтона—Якоби, получим

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = E,$$

учитывая выражение для гамильтонiana H , можно это выражение записать в виде

$$\sum_i \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \right)^2 = 2m(E - U), \text{ или } |\operatorname{grad} S|^2 = 2m(E - U)$$

и

$$|\operatorname{grad} S| = \sqrt{2m(E - U)},$$

и также

$$|\operatorname{grad} S_0| = \sqrt{2m(E - U)}.$$

Полученному результату можно дать простую геометрическую интерпретацию. Уравнение $S = S_0(q_i) - Et = \text{const}$ можно рассматривать как уравнение, описывающее семейство поверхностей в конфигурационном пространстве q_i , так что каждому значению t соот-

¹⁾ Ш р е д и н г е р Э. Избранные труды по квантовой механике, с. 21.

ветствует своя определенная поверхность $S_0(q_i) = Et$. Для каждой поверхности в каждой точке можно построить нормаль n . При этом, по определению градиента,

$$\frac{dS_0}{dn} = |\text{grad } S_0| = \sqrt{2m(E - U)}.$$

Но вместо того чтобы рассматривать семейство поверхностей для различных моментов t , можно положить, что все эти поверхности являются одной и той же поверхностью в разные моменты времени, т. е. рассматривать эту поверхность распространяющейся в пространстве (q_i) . Очевидно, что скорость распространения поверхности $u = \frac{dn}{dt}$. Учитывая, что $S(q_i, t) = S_0(q_i) - Et = \text{const}$, имеем $dS_0(q_i) = Edt$ и для скорости распространения поверхности $S_0(q_i)$ получим

$$u = E / \sqrt{2m(E - U)}.$$

Таким образом, получена картина, аналогичная картине распространения волн, причем $S(q, t)$ поверхность фазы, а скорость распространения поверхности равного действия равна фазовой скорости. Однако эта аналогия, известная уже Гамильтону, не полная. Она справедлива, если ограничиться только геометрической оптикой, которая является лишь приближением к волновой или физической оптике. Такие основные понятия волновой оптики, как уравнение распространения волн, длина волны, частота колебания и т. д., совсем не используются в данной аналогии. Но возможно, что обычная механика также является приближенной, справедливой только для обычных макропроцессов, и должна быть заменена для микропроцессов более точной механикой. Во всяком случае, такое предположение возникает, если обратиться к атомным явлениям. В этом случае, распространяя оптико-механическую аналогию и опираясь на идеи де Бройля, можно предположить, что механика для микропроцессов должна иметь волновой характер.

«Быть может, наша классическая механика,— пишет Шредингер,— представляет полную аналогию с геометрической оптикой и подобно последней откладывается служить и не согласуется с действительным положением вещей при размерах и радиусе кривизны траекторий, приближающихся по величине к некоторой длине волны, которая теперь принимает в q -пространстве реальный смысл»¹⁾.

Продолжая рассуждать таким образом, Шредингер приходит к мысли, что механические процессы следует понимать или изображать как некие волновые процессы, характеризуемые волновой функцией Ψ . Тогда образ материальной точки, занимающей, например, определенное место в пространстве, строго говоря, является приближенным и может быть сохранен только при рассмотрении макропроцессов, подобно тому, как мы пользуемся представлением о световом лу-

¹⁾ Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике, с. 26—27.

че, которое теряет смысл, если рассматривать явления дифракции и интерференции.

Функция Ψ должна удовлетворять волновому уравнению

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0.$$

Полагая, как обычно, что $\Psi = \psi(q_i) e^{2\pi i \nu t}$, и подставляя Ψ в волновое уравнение, имеем

$$\nabla^2 \psi + \frac{4\pi^2 \nu}{u^2} \psi = 0.$$

Учитывая далее, что $\nu = E/h$ и $u = E / \sqrt{2m(E-U)}$, это уравнение можно записать в виде

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi = 0.$$

Таким образом, получено уже известное из предыдущей статьи волновое уравнение Шредингера в общем виде. Шредингер ставит вопрос о связи его теории с теорией Гейзенберга, Борна и Иордана. Он высказывает мысль, что, несмотря на то что обе теории основываются на совершенно различных принципах, тем не менее между ними должно существовать связующее звено.

«Я совершенно уверен в том, что обе эти попытки,— пишет Шредингер,— не только не будут противоречить друг другу, но даже, наоборот, вследствие полного различия исходных положений и методов окажутся взаимно дополняющими. Сила гейзенберговской программы заключается в том, что она обещает вычислять интенсивности линий, в то время как мы к этому вопросу пока совершенно не подходили. Сила же представленного в данной работе метода заключается, как я могу судить, в использовании руководящего физического представления... Мне лично особенно нравится приведенное в конце предыдущей статьи истолкование излучаемых частот как «биений», причем я думаю, что таким образом будет получено также наглядное истолкование формул для интенсивности¹⁾.

В том же году в работе «О соотношении квантовой механики Гейзенберга, Борна, Иордана и моей»²⁾ Шредингер впервые установил связь между квантовой и волновой механикой, которую уточнил в последующих работах. Он показал, что при всем различии исходных физических положений они математически эквивалентны. Основные идеи Шредингера в данном исследовании (в уточненном впоследствии виде) заключаются в следующем. Связующее звено между матричной и волновой механикой Шредингер видит в понятии линейного дифференциального оператора. Именно физической величине, являющейся функцией q и p , нужно сопоставить определенный оператор F .

Пусть имеется полная ортогональная система волновых функций $\psi_1(q), \psi_2(q), \psi_3(q), \dots$, являющихся решением волнового уравнения для

1) Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике, с. 39.

2) Там же, с. 56. [Одновременно со Шредингером эту задачу решил Эккерт (Phys. Rev., 28, 1926, p. 711).]

какой-нибудь физической задачи, которая нормирована, т. е. выполняется условие

$$\int \psi_k(q) \psi_l^*(q) dq = \begin{cases} 1 & \text{при } k=l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases}$$

Пусть, далее, каждой из функций соответствует собственное значение, определяемое параметром, которым является энергия системы, т. е. E_1, E_2, E_3, \dots . Образуем теперь с помощью волновых функций и какого-либо оператора \mathbf{F} матрицу с элементами

$$F_{kl} = \int \psi_k(q_k) [\mathbf{F} \psi_l^*(q)] dq,$$

где $[\mathbf{F} \psi_l^*(q)]$ — функция координат, получаемая при действии оператора \mathbf{F} на функцию ψ_l .

Положим, что оператор умножения на q соответствует координате q : тогда соответствующая матрица имеет элементы

$$q_{kl} = \int \psi_k(q_k) q \psi_l^*(q) dq.$$

Определив оператор для координаты q , можно аналогично определить и операторы для q^2, q^3 и т. д.

Для того чтобы определить вид оператора и соответствующей матрицы для импульса p , используем перестановочное соотношение. Рассмотрим оператор

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial q}.$$

Легко видеть, что действие этого оператора на какую-либо функцию координат $\psi(q)$ сводится к умножению ее на $-\hbar/2\pi i$, т. е.

$$\mathbf{L} \psi(q) = -\frac{\hbar}{2\pi i} \psi(q).$$

Отсюда элементы матрицы, соответствующие оператору \mathbf{L} , таковы:

$$\begin{aligned} L_{kl} &= \int \psi_k(q) \mathbf{L} \psi_l^*(q) dq = -\frac{\hbar}{2\pi i} \int \psi_k(q) \psi_l^*(q) dq = \\ &= \begin{cases} \hbar/(2\pi i) & \text{при } k=l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \end{aligned}$$

Но элементы матрицы $\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{I}$, выражающей перестановочное соотношение, равны тем же величинам, только взятым с обратным знаком. Поэтому, учитывая, что оператором для координаты q является просто оператор умножения на q , приходим к заключению, что оператор, соответствующий импульсу p , должен иметь вид

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}.$$

При этом

$$p_{kl} = -\frac{\hbar}{2\pi i} \int \psi_k(q) \frac{\partial}{\partial q} \psi_l^*(q) dq$$

— элемент соответствующей матрицы.

Теперь можно образовать операторы и соответствующие матрицы, которые представляют разные физические величины, выражющиеся в виде определенных функций q и p . Особое значение при этом имеет оператор Гамильтона или в данном случае оператор энергии

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + U(q),$$

который, согласно определению оператора для p , имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \right)^2 \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \right)^2 + U(q).$$

Действие этого оператора на какую-либо из собственных функций $\psi_k(q)$ должно сводиться к умножению ее на собственное значение энергии E_k . Это сразу следует из уравнения Шредингера, которое можно записать в виде

$$H\psi = E\psi.$$

Так как это уравнение удовлетворяется любой из функций $\psi_k(q)$, то

$$H\psi_l(q) = E_l \psi_l(q), \quad \text{или} \quad H\psi_l^*(q) = E_l \psi_l^*(q).$$

Умножая последнее уравнение на какую-либо другую функцию $\psi_k(q)$ и интегрируя, получаем выражение для элемента матрицы энергии:

$$\begin{aligned} E_{kl} &= \int \psi_k(q) H\psi_l^*(q) dq = \int \psi_k(q) E_l \psi_l^*(q) dq = \\ &= E_{kl} \int \psi_k(q) \psi_l^*(q) dq = \begin{cases} E_{kl} & \text{при } k=l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \end{aligned}$$

Таким образом, матрица энергии должна быть диагональной матрицей, и ее диагональные элементы, отличные от нуля, равны значениям энергии E_{kk} или просто E_k .

Как показал Шредингер, все матрицы, образованные с помощью собственных функций $\psi_1(q), \psi_2(q), \dots$, являющиеся решением волнового уравнения и соответствующие определенным операторам, применяются в матричной механике и представляют собой матрицы Гейзенберга. Правда, элементы матриц Гейзенберга имеют множитель $e^{i\omega_k t}$ или $e^{i\frac{2\pi}{\hbar}(E_k - E_l)t}$. Однако если вспомнить, что и в теории Шредингера, вообще говоря, волновая функция для стационарного состояния с определенной энергией E_k должна иметь вид

$$\Psi_k(q, t) = \psi_k(x) e^{i\frac{2\pi}{\hbar} E_k t}$$

и, следовательно, нужно, вообще говоря, при образовании соответствующих матриц использовать функцию $\Psi_k(q, t)$, а не $\psi_k(q)$, то мы и получим матрицы, имеющие множитель $e^{i \frac{2\pi}{\hbar} (E_k - E_l)t}$. Так, например, элемент матрицы, соответствующей координате, равен

$$\int \Psi_k(q, t) q \Psi_l^*(q, t) dq = \int \psi_k(q) q \psi_l^*(q) dq e^{i \frac{2\pi}{\hbar} (E_k - E_l)t} = \\ = q_{kl} e^{i \frac{2\pi}{\hbar} (E_k - E_l)t}.$$

То же самое и для других матриц. Эти матрицы уже полностью совпадают с матрицами Гейзенберга.

Таким образом, все матрицы Гейзенберга, рассматриваемые в матричной механике, получаемые с помощью соответствующего формализма, вычисление которых являлось задачей этой механики, Шредингер получает, решая волновое уравнение. Отсюда следует, что с математической точки зрения матричная и волновая механики эквивалентны.

Теперь, для того чтобы решить вопрос об интенсивностях частот, излучаемых квантовой системой, следовало воспользоваться тем, что этот вопрос в матричной механике уже был решен. Так, например, интенсивность какой-либо из спектральных линий определенной частоты, излучаемой атомом водорода, определялась амплитудой элемента матрицы, соответствующей электрическому моменту электрона в этом атоме. Так, собственно говоря, и поступил Шредингер. Однако он дал свою физическую интерпретацию процесса излучения, основанную на представлении о волновой функции. Электрон, по мнению Шредингера, не является частицей, а представляет собой электрический заряд, размазанный в пространстве. При этом плотность заряда определяется волновой функцией так, что $|\Psi|^2$ или $\Psi\Psi^*$ равно плотности заряда. С этой точки зрения атом водорода представляет собой ядро, окруженное облаком отрицательного заряда, и если атом находится в стационарном состоянии, то плотность заряда $\Psi\Psi^*$ не зависит от времени и остается постоянной. Если же атом находится в состоянии, которое описывается более сложной волновой функцией, то плотность заряда меняется и атом излучает.

В общем случае волновую функцию электрона в атоме водорода можно записать в виде

$$\Psi = \sum_k c_k \psi_k(q) e^{i \frac{2\pi}{\hbar} E_k t}.$$

Тогда плотность заряда

$$\Psi\Psi^* = \sum_k c_k c_{k'} \psi_k(q) \psi_{k'}^*(q) e^{-i \frac{2\pi}{\hbar} (E_k - E_{k'}) t},$$

т. е. плотность заряда не остается постоянной, а осциллирует с частотами $\nu_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} (E_k - E_{k'})$, которые совпадают с боровскими час-

тотами. Для того чтобы найти интенсивность излучения, нужно определить изменение со временем электрического момента атома M , например в направлении оси x . Возьмем простой случай, когда состояние атома характеризуется функцией

$$\Psi = c_k \psi_k e^{\frac{2\pi i}{\hbar} E_k t} + c_s \psi_s e^{\frac{2\pi i}{\hbar} E_s t};$$

тогда

$$M_x = e \int \Psi x \Psi^* dt = ec_k c_k^* \int \psi_k x \psi_k^* dt + ec_s c_s^* \int \psi_s x \psi_s^* dt + 2e |c_k| |c_s| \int \psi_k x \psi_s^* dt \cos 2\pi \left[\frac{E_k - E_s}{\hbar} t \right].$$

Таким образом, в этом случае атом излучает частоту

$$\nu_{ks} = (E_k - E_s)/\hbar,$$

амплитуда которой определяется величиной $2e|c_k||c_s| \int \psi_k x \psi_s^* dt$, пропорциональной соответствующей матрице Гейзенберга.

Интерпретация волновой функции показалась Шредингеру удачной. Во-первых, она была наглядной (в отличие от представлений матричной механики, которые носили формальный символический характер). Во-вторых, теория Шредингера, как он предполагал, возвращала к представлению о непрерывности процессов, происходящих в физике. Говоря о том, как можно себе представить механизм излучения атомом света с помощью вышеприведенных соображений, Шредингер в том же 1926 г. писал Лоренцу:

«Я сразу настолько обрадовался тому, что удалось получить картину, где хоть что-то имеет действительное отношение к тем частотам, которые мы наблюдаем в излучаемом свете, что я с бьющимся сердцем загравленного беглеца набросился на это что-то в том виде, в котором оно представилось непосредственно, именно на амплитуды, изменяющиеся периодически с частотой биений. Этим я хотел лишь сказать, что мыслим такой механизм посредством которого эти изменяющиеся амплитуды возбуждают свет той же частоты. Наоборот, дисcrete частоты боровской модели казались мне, и сейчас кажутся (уже с 1914 г.) чем-то столь чудовищным, что я охарактеризовал бы возбуждение света таким путем, как немыслимое»¹⁾

Однако, как ни заманчива была такая интерпретация, она встретила целый ряд трудностей. Во-первых, чтобы атом излучал, он должен был находиться сразу в нескольких, по крайней мере двух, состояниях. Следовательно, возможность спонтанного излучения атома, находящегося в возбужденном стационарном состоянии, исключалась, чо противоречило ранее существовавшим взглядам. Во-вторых, указанное простое толкование волновой функции допустимо только для атома водорода, который обладает одним электроном. Для многоэлектронных атомов Ψ^* уже нельзя было рассматривать как плотность электрического заряда, распределенного в пространстве, поскольку в этом случае

¹⁾ Шредингер Э. Новые пути в физике.—Статьи и речи. М., «Наука». 1971, с. 208.

ψ — функция координат всех электронов и, если и можно говорить о величине $\psi\psi^*$ как о плотности электрического заряда, то только в конфигурационном пространстве $3n$ -измерений, где n — число электронов в атоме. Но в этом случае волновая функция уже теряет свой наглядный смысл.

Наконец, как интерпретировать с точки зрения волновой функции существование электрона как частицы? Для решения этого вопроса Шредингер обратился к представлению о волновом пакете. Он высказал сначала мысль, что электрон в тех случаях, когда он проявляет себя как частица, является определенной группой волн де Броиля, так называемым волновым пакетом. Однако, несмотря на то что он уделил этому вопросу достаточное внимание, провести эту точку зрения ему не удалось. Расчеты показали, что, исключая частный случай осциллятора, не удается образовать такую группу волн (волновой пакет) из волн де Броиля, которая бы достаточно долго могла сохранять свои размеры в пространстве, двигаясь как целое. Хотя в начальный момент времени из волн де Броиля и можно было составить такой волновой пакет, что $\Psi\Psi^*$ практически отличалось от нуля лишь в малой области пространства и он мог быть интерпретирован как частица, тем не менее в общем случае довольно быстро эта группа волн будет расползаться по всему пространству и ее уже нельзя интерпретировать как частицу.

Все эти вопросы сразу же встали перед Шредингером. Он старался их решить, продолжая работать над дальнейшим построением теории. Прежде всего, разрабатывая вопрос излучения атома, он обобщил волновое уравнение на случай, когда волновая функция зависит от времени, а затем рассмотрел вопрос дисперсии. До сих пор Шредингер рассматривал задачу о стационарных состояниях атома, представляющего консервативную систему. Для решения этой задачи он установил уравнение, которое не содержало времени. Для решения же более общей задачи, например задачи об атоме, находящемся в переменном электромагнитном поле, нужно было установить более общее волновое уравнение, содержащее время. Для нахождения такого уравнения можно было бы воспользоваться аналогией с оптикой, полагая, что уравнению

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\psi = 0$$

в оптике соответствует уравнение

$$\Delta\varphi_0 + \frac{\omega^2}{u^2} \varphi_0 = 0.$$

Полное же уравнение волновой механики должно соответствовать полному волновому уравнению в оптике:

$$\Delta\varphi \mp \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \varphi}{dt^2} = 0.$$

Учитывая, что скорость распространения волн де Броиля

$$u = E / \sqrt{2m(E - U)},$$

получим

$$\Delta\Psi + \frac{2m(E - U)}{E^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0.$$

Однако это уравнение не подходит, так как содержит E — энергию, которая в волновой механике имеет смысл частотного параметра и поэтому в полное уравнение не должна входить.

Шредингер поступает иначе. Он берет выражение для Ψ в виде

$$\Psi = \psi(q) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} Et},$$

дифференцирует Ψ по времени:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi \frac{2\pi}{\hbar} i E \Psi$$

и исключает E из этого уравнения и стационарного уравнения

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0.$$

Полученное уравнение

$$\Delta\Psi - \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} U\Psi - i \frac{4\pi m}{\hbar} \frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0$$

и является полным уравнением волновой механики по Шредингеру.

Шредингер применяет это уравнение при рассмотрении задачи о дисперсии. При этом он использует математический аппарат теории возмущений, полагая, что атом находится во внешнем электрическом поле, которое мало по сравнению с внутриатомным электрическим полем, а также что внешнее электрическое поле создается плоской монохроматической волной, длина которой велика по сравнению с размерами атома. В этом случае потенциальную энергию электрона в атоме можно записать в виде

$$U = U_0 + V,$$

где U_0 — потенциальная энергия электрона в отсутствие возмущения, а $V = exE_0 \cos \omega t$. Здесь e — заряд электрона, E_0 — амплитуда возмущающего поля, x — координата, в направлении которой на электрон действует сила со стороны плоской волны. Уравнение Шредингера для данного случая имеет вид

$$\Delta\Psi - \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (U_0 + V) \Psi - i \frac{4\pi m}{\hbar} \frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0,$$

и его решение можно искать в виде

$$\Psi_k(q,t) = \psi_k(q) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} E_k t} + W_k(q,t),$$

где $\varphi_k(q)$ — собственная функция в отсутствие возмущения. Шредингер нашел выражение для $\Psi_k(q, t)$, а затем значение электрического момента M_x в направлении оси x . Зная M_x , можно найти показатель преломления n . При этом для n получается выражение, идентичное формуле Ладенбурга — Крамерса, о которой мы выше говорили.

Далее, $|\Psi(q, t)|^2$ (или $\Psi\Psi^*$) испытывает периодические изменения с частотой, равной частоте падающего на атом возмущения в направлении оси x . Согласно Шредингеру, это означает, что плотность электрического заряда в каждой точке пространства осциллирует с этой частотой.

Успехи теории Шредингера сделали эту теорию весьма популярной. С одной стороны, с точки зрения математического формализма она была более удобна, нежели матричная механика. С другой стороны, казалось, во всяком случае сначала, что она дает возможность интерпретировать с понятной точки зрения закономерности атомной физики (без неизвестных квантовых скачков, без отказа от наглядных представлений и т. д.).

Бор в своих воспоминаниях писал:

«Волновая механика завоевала намного большую популярность, чем гетингенский и кембриджский варианты квантовой механики»¹⁾,

т. е. теория, разработанная Гейзенбергом и др., а также Дираком в Англии. Однако многие теоретики и прежде всего Бор и основоположник матричной механики Гейзенберг, а также Дирак, возражали против шредингеровской интерпретации волновой функции.

В 1926 г. Шредингер был приглашен в Копенгаген, где при участии Бора развернулась жаркая полемика вокруг шредингеровской интерпретации квантовой механики. Бор очень настойчиво пытался убедить Шредингера в полной невозможности такой интерпретации, оставаясь на принципах классической физики. Однако Шредингер не сдавался.

«Я помню споры с Бором, — писал Гейзенберг, — которые продолжались допоздна и заканчивались чуть ли не полным отчаянием»²⁾.

«Если бы я мог предположить, — заметил как-то Шредингер с горечью, — что волновая теория будет принята столь серьезно и вызовет такую дискуссию, я бы ее никогда не выдвигал»³⁾.

Но если не принимать шредингеровскую интерпретацию волновой функции, то что следует понимать под этой функцией, какой физический смысл нужно придать величине Ψ , — на этот вопрос по-новому ответил Бор в том же 1926 г., предложив вероятностное толкование этой функции⁴⁾. По мнению Борна, волновая функция не представляет собой никакого реального физического поля, а имеет вероятностный смысл, подобно функции распределения, применяемой в статистической физике. К этой идеи Бор пришел под влиянием замечания Эйнштейна о том, что двойственная природа света может быть просто понята, если

1) Бор и М. Физика в жизни моего поколения. М., ИЛ, 1963, с. 307—308.

2) Мур Р. Нильс Бор — человек и ученьи. М., «Мир», 1969, с. 184.

3) Там же, с. 183.

4) Бор и М. Zeitschr. f. Phys., B. 38, 1926, S. 803.

принять, что амплитуда световых волн, а значит, и плотность энергии определяются средней плотностью фотонов в данной точке пространства. С этой точки зрения можно было считать, что физической реальностью в световом луче обладают фотоны, тогда как электромагнитное поле является фиктивным, «призрачным» (Gespensterfeld) или «управляющим» (Führungsfeld) полем. Распространяя эту идею на квантовую механику, Борн и предположил, что функция Ψ также может иметь только статистический, вероятностный смысл, заключающийся в том, что $\Psi^*\Psi$ определяет плотность вероятности пребывания частицы в данной точке пространства. Основание для такого понимания функции Ψ Борн видел в анализе процесса рассеяния частиц силовым центром. С классической точки зрения эта задача рассматривалась так: на силовой центр падает в направлении, например, оси z поток частиц, который рассеивается этим центром; следует определить относительное число частиц, рассеянных под определенным углом к первоначальному направлению их движения. В волновой механике эту задачу нужно рассматривать с несколько иной точки зрения. В данном случае можно считать, что все падающие частицы не взаимодействуют друг с другом, поэтому нужно искать волновую функцию одной падающей частицы. Такую волновую функцию можно представить как сумму падающей плоской волны и волны, расходящейся от силового центра, т. е.

$$\Psi = u(z) + \varphi(r).$$

Эта волновая функция должна удовлетворять уравнению Шредингера

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} [E - U(r)]\Psi = 0,$$

где $U(r)$ — потенциальная энергия частицы в поле данного силового центра; E — полная энергия частицы, которая в отличие от энергии электрона в атоме водорода должна быть положительной. Полагая, что эта волновая функция является решением данного уравнения Шредингера, Борн нашел ее асимптотическое выражение для $r \rightarrow \infty$. Если теперь определить выражение $|\varphi(r)/u(z)|^2$ как функцию угла рассеяния, то получим аналогичное выражение, которое дает теория Розерфорда для отношения числа α -частиц, отклоненных на определенный угол, к числу частиц, прошедших без отклонения при рассеивании их силовым центром. Естественно теперь было принять, что $|\Psi^2|$ означает плотность вероятности пребывания частицы в данной точке пространства.

Статистическая интерпретация волновой функции, предложенная Борном, получила вскоре широкое признание и стала в основном обще принятой. Но теперь возник вопрос о природе статистичности квантовой механики, вокруг которого развернулась впоследствии дискуссия (на ней мы остановимся ниже). Сейчас же кратко упомянем о дальнейшем развитии квантовой механики.

Прежде всего следует отметить, что весьма быстро после первых работ Гейзенберга, Борна и Иордана, Дирака и Шредингера был разработан современный математический аппарат нерелятивистской кван-

товой механики. Появился целый ряд монографий, посвященных основам квантовой механики, в которых в систематической форме излагался ее математический аппарат, основанный на представлении физических величин в виде операторов (с применением так называемой теории представлений) и т. д.¹⁾.

В 1927 г. волновая механика получила новое прямое экспериментальное подтверждение. В этом году Дэвиссоном и Джермером было обнаружено явление дифракции электронов. Еще в 1921 г. Рамзауэр заметил, что при рассеянии электронов в газах наблюдается отклонение от результатов, предсказываемых классической теорией рассеяния частиц силовым центром. Дэвиссоном и Кунсменом в 1923 г. было отмечено, что при рассеянии электронов на поверхности металла кривая рассеяния электронов по углам иногда имеет несколько более или менее выраженных максимумов, что не соответствовало теории. В 1925 г., после работ де Брайля, Эльзассера высказал мысль, что наблюдаемая аномалия является результатом волновой природы электрона и подтверждает гипотезу де Брайля. Однако к этой идеи многие отнеслись прохладно, в том числе и сам Дэвиссон.

В 1927 г. Дэвиссон совместно с Джермером производили новые опыты по рассеянию электронов на поверхности металлов. Для исправления случайной поломки им пришлось сильно прокалить установку. Произошла перекристаллизация, и вместо множества мелких кристаллов металла, от поверхности которых наблюдалось рассеяние электронов, образовалось несколько больших, и картина распределения рассеянных электронов по углам изменилась. Теперь уже не могло быть сомнений, что наблюдается явление дифракции электронов от кристаллической решетки, подобно дифракции рентгеновских лучей.

Вскоре явление дифракции электронов было обнаружено и исследовано рядом других физиков. Таким образом, гипотеза де Брайля получила прямое экспериментальное подтверждение, оказалось правильным и найденное им количественное соотношение для длин волн де Брайля. Кроме оправдания квантовой механики непосредственным подтверждением волновой природы электрона с помощью этой теории удалось построить более совершенную теорию твердого тела, теорию электропроводности, термоэлектрических явлений, теорию магнетизма и т. д. Квантовая теория дала возможность приступить к построению теории радиоактивного распада, а в дальнейшем стала основой для новой области физики — ядерной физики и т. д.

Вслед за основополагающими работами Шредингера по волновой механике были сделаны первые попытки релятивистского обобщения

¹⁾ В качестве первых обобщенных работ по квантовой механике можно назвать следующие: Sommerfeld A. Atombau und Spektrallinien, Wellenmechanischer Ergänzungsband. Braunschweig, 1929 (Зоммерфельд А. Волновая механика. М.—Л., ГТТИ, 1933); Heisenberg W. Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie. Leipzig, 1930 (Гейзенберг В. Физические принципы квантовой теории. М.—Л., ГТТИ, 1932); Dirac P. A. M. The principles of quantum mechanics. Oxford, 1930 (Дирак П. А. М. Основы квантовой механики. Л.—М., ГТТИ, 1932), и др.

квантовомеханических закономерностей, и уже в 1928 г. Дирак заложил основы релятивистской квантовой механики. Однако рассмотрение этого вопроса выходит за рамки настоящей книги.

§ 71. РАЗВИТИЕ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Как было отмечено выше, математический аппарат квантовой механики был создан очень быстро. Однако он в значительной степени был разработан путем догадок, проведенных весьма нестрогих с логической точки зрения аналогий и т. д. И хотя этот аппарат весьма успешно применялся и позволял решать многие задачи атомной физики, тем не менее физический смысл новой теории казался неясным и противоречивым.

Матричный вариант квантовой механики вообще создавался при принципиальном отказе от использования какой-либо картины физических процессов, происходящих в атоме, и с самого начала имел чисто формальный характер; что же касается волнового варианта квантовой механики, то хотя де Бройль, а затем Шредингер и пытались опираться на некоторые конкретные физические представления, тем не менее эти представления были не вполне ясными и также противоречивыми. Представление Шредингера о частице как о волновом пакете было быстро подвергнуто существенной критике. Его же идея о том, что волновая функция представляет собой размазанный заряд электрона, также встречала серьезные возражения и не разделялась ни Бором, ни Гейзенбергом, ни другими физиками-теоретиками, работающими в области теории атома.

Решающий шаг на пути выяснения физического смысла квантовой теории был сделан Борном, который, как мы видели выше, указал на статистический смысл волновой функции. Эта точка зрения Борна скоро стала общепризнанной. Однако выяснение статистического характера волновой функции еще далеко не решало всех методологических вопросов квантовой механики. Оставались вопросы о смысле статистичности квантовой механики, проблема так называемого корпускулярно-волнового дуализма микрочастиц и т. д. Все эти вопросы стояли перед физиками, работающими в области теории атома, а также философами, которые занимались методологическими проблемами физики. В самом начале возникло два основных направления в интерпретации квантовой механики. Одно из них заключалось в попытке мыслить как реально существующие и частицы, и некие реальные волны, т. е. решить проблему корпускулярно-волнового дуализма как сосуществование и частицы, и волны. На этот путь первоначально встал де Бройль, однако он не смог получить положительных результатов.

Второе направление в интерпретации квантовой механики, возглавляемое Бором, Гейзенбергом и др., известно как интерпретация копенгагенской школы. Эта интерпретация получила довольно широкое распространение.

Остановимся сначала на интерпретации квантовой механики, которую пытался дать де Бройль в 1927 г.¹⁾. Собственно говоря, де

¹⁾ L. de Broglie. Journ. d. Phys., ser. VI, t. VIII, № 5, 1927, p. 225.