

атома «вещество электрона» оказались безуспешными. По предположению М. Борна волнам материи была дана иная интерпретация. Волна материи одиночного электрона отвечает «волне вероятности». Электрон описывался волновой функцией ψ , квадрат которой (точнее, квадрат модуля) $|\psi|^2$ определял вероятность нахождения электрона в том или ином месте. Но это означает, что ответ на вопрос, где находится электрон, нельзя получить с определенностью. Может здесь, а может, и не здесь. Он может находиться в любом месте, где $|\psi|^2 \neq 0$. Физическое описание становится неопределенным. Более того, неопределенность возводилась в принцип — в *принцип неопределенности*, предложенный В. Гейзенбергом.

Атом. Принцип Паули

Какова же вероятность нахождения электрона в данном месте? Как она меняется со временем? На эти вопросы отвечало основное уравнение квантовой механики — *уравнение Шредингера*.

Решив это уравнение, можно было получить ответы на многие вопросы, связанные с загадочным поведением электрона.

Квантовая механика дает уравнение для комплексной волновой функции $\psi(r, t)$. Квадрат модуля этой комплексной величины (см. Математическое дополнение, с. 221), т. е. величина $\psi^*(r, t) \cdot \psi(r, t) = P(r, t) > 0$ определяет вероятность нахождения электрона в данной точке пространства в данный момент времени. В частности, известно, что если электрон или любая другая система микрочастиц находится в стационарном состоянии с определенной энергией E , то $\psi(r, t) = \psi(r) e^{-iEt/\hbar}$ есть решение уравнения Шредингера. Из уравнения Шредингера можно определить энергию таких состояний. Например, энергию электрона, связанного в атоме. Оказалось, что при $E < 0$ такие решения существуют лишь при определенных выделенных значениях E_0, E_1, E_2, \dots и все эти значения отрицательны. При этом квадрат модуля волновой функции электрона в атоме определяет вероятность нахождения электрона в том или ином месте внутри атома. Волновая функция свободного электрона отвечает бегущей волне.

Вероятность — величина существенно положительная. Волновая функция — величина комплексная, и, в частности, может принимать отрицательные значения. Для волн вероятности, как и для любых волн, возможна интерференция — сложение волновых функций может как увеличивать, так и уменьшать полную вероятность.

Создание квантовой механики позволило объяснить структуру атома водорода. При переходе к другим атомам возникало математическое осложнение — в многоэлектронных атомах нужно было учитывать не только кулоновское взаимодействие электронов с ядром, но и кулоновское взаимодействие электронов атома между собой. Но это затруднение можно было преодолеть. Более серьезной оказалась проблема описания закономерностей, связанных с периодическим законом Менделеева.

Изучение строения атома показывало, что атом обладает определенной структурой электронных орбит. Казалось бы, наиболее естественным было бы, что все электроны находились в состоянии с минимальной энергией, на ближайшей к ядру электронной орбите. Ведь согласно теории Бора, если бы электрон находился на более далекой орбите, он мог бы, испустив электромагнитный квант, перейти на более близкую к ядру орбиту. Но этого не происходило. Например, у атома лития, обладающего тремя электронами, на ближней орбите находятся только два электрона, а третий обладает более высокой энергией, и тем не менее этот атом стабилен. Электрон с высоко лежащей орбитой на нижний уровень не переходит. И подобными свойствами обладала структура атомов всех остальных более тяжелых, чем литий, элементов. Чтобы объяснить такую сложную структуру заполнения электронных орбит в атомах, Паули предложил принцип запрета: два электрона не могут находиться в одном и том же состоянии. Если они обладают одинаковой энергией, у них должны отличаться другие характеристики. Результаты опытов по изучению поведения атомов в магнитном поле легко объяснялись, если бы электрон обладал собственным вращательным моментом, который называли *спином*. Без учета спина заполнение орбит подчинялось правилу: на каждой орбите не более *двух* электронов. С учетом спина электрона правило Паули формулируется еще

проще: на каждой данной орбите и с данным направлением спина может находиться только один электрон (или ни одного электрона). Спин, т. е. вращение электрона приводит к тому, что электрон ведет себя не только как точечный заряд, но и как маленький круговой ток, т. е. как магнитик.

Магнитные измерения подтверждают именно приведенную выше формулировку принципа Паули: 2 электрона, находящиеся в одном «пространственном» состоянии (на старом языке — на одной орбите) должны иметь спины, направленные в противоположные стороны, и суммарный магнитный момент таких двух электронов равен нулю.

Спин имеет размерность вращательного момента: размерность импульса, помноженную на размерность расстояния, т. е. $г \cdot см^2/с$, а это как раз размерность постоянной Планка \hbar . В квантовой механике вращательный момент L оказывается целым, кратным \hbar , причем вращательному моменту L (в единицах \hbar) отвечают $(2L + 1)$ различных состояний с различными значениями проекции на данную ось. Спин электрона (в единицах \hbar) равен $1/2$ и может иметь две различные проекции $+1/2$ и $-1/2$ на данную ось*). На одном и том же энергетическом уровне электроны обладают различной величиной проекции вращательного момента или направлением спина. Добавляя электроны, мы будем наблюдать заполнение энергетического уровня до тех пор, пока все возможные различия электронных состояний не будут исчерпаны. Если оболочка заполнена и все возможные отличающиеся друг от друга состояния уже заняты, на эту оболочку больше нельзя добавить электроны. Добавление электронов приведет к заполнению следующих более высоколежащих орбит, с которых нельзя перейти на заполненные до отказа низколежащие энергетические уровни.

*) Подчеркнем, что речь идет о проекциях на любую ось. Величина проекций равна $+1/2$ и $-1/2$ независимо от направления оси. Иногда условно говорят о состояниях «спин вверх» и «спин вниз». Понятно, что с тем же успехом можно говорить «вправо»—«влево». Число состояний — два — не зависит от этого выбора. Если есть магнитное поле, то оно выделяет эти два состояния: состояние с направлением спина по полю имеет энергию $+\mu H$ и энергию $-\mu H$ — против поля. Число состояний (два) имеет чисто квантовую природу и равно числу возможных проекций спина s на данную ось: $(2s + 1)$.

Так принцип Паули позволил объяснить химические свойства элементов, определяемые электронами внешних незаполненных оболочек. Периодичность в заполнении электронных оболочек давала фундаментальное физическое обоснование периодическому закону Менделеева. Принцип Паули позволил объяснить наблюдаемую структуру электронных оболочек атомов, насыщение этих оболочек, отсутствие переходов электронов высоколежащих уровней на низколежащие уровни многоэлектронных атомов *).

Если на электрон или любую другую квантово-механическую систему оказывается воздействие, то решения уравнения Шредингера дают ответ на вопрос об изменении состояния системы со временем. Ответ оказывается вероятностным: через некоторое время система может с разной вероятностью оказаться в разных состояниях. Решая уравнение Шредингера, можно определить, с какой именно вероятностью система окажется в том или ином состоянии.

Но была в теории Шредингера одна трудность.

Теория относительности требовала одинакового описания явлений во всех инерциальных системах отсчета. Этому требованию уравнение Шредингера не удовлетворяло.

В книге мы уделяем несоответственно мало внимания квантовой механике атомов. Замечательные области — квантовая механика молекул, квантовая химия, теория твердых тел (диэлектриков, полупроводников, металлов) — остаются за рамками нашего повествования. Но невозможно объять необъятное, как сказал еще Козьма Прутков. К тому же развитие квантовой механики в этих областях скорее похоже на повесть о мирной семейной жизни героев, бурно сражавшихся в молодости в той драме идей, которую мы стараемся изложить. Но и идилии имеют своих читателей, которых мы отсылаем к прекрасным книгам

*) Подчеркнем, что принцип Паули — это совсем не электрическое или иное отталкивание электронов. Этот принцип отражает антисимметрию волновых функций электронов, наличие у электронов полуцелого спина. Статистические свойства бозонов ведут к симметрии их волновых функций. Например, два ядра ⁴He описываются симметричной волновой функцией, хотя каждое из них состоит из 4 фермионов, т. е. частиц с полуцелым спином — двух протонов и двух нейтронов. Мы сознаем, что эти краткие замечания могут в лучшем случае возбудить интерес к свойствам ядер, атомов и молекул.

Л. И. Френкеля, Л. Де Бройля, Э. В. Шпольского и др.

Мы перескакиваем из эпохи 1905—1912 гг. сразу в 1928 г., хотя именно в 1912—1928 гг. были заложены все основы атомной физики, молекулярной физики, молекулярной биологии. Но наша тема другая.

Теория Дирака

В 1928 г. молодой английский теоретик П. А. М. Дирак предложил свое квантовое уравнение для описания движения электрона и его взаимодействия с электромагнитным полем, удовлетворяющее теории относительности. В теории атома эффекты теории относительности невелики — существование массивного ядра атома приводит к выделенной системе отсчета, связанной с ядром. Но на основе уравнения Дирака можно было рассчитать и поправки, обусловленные тем, что отношение скорости движения электрона к скорости света не равно нулю. Было у этого уравнения и еще одно преимущество: оно с неизбежностью однозначно требовало существования вполне определенного спина электрона и предсказывало вполне определенную величину его магнитного момента μ . Найденное из опыта значение μ совпадало с вычисленным с точностью 0,1%. «Внутреннее вращательное движение» электрически заряженного электрона определяло его магнитное взаимодействие — делало его элементарным магнитиком. Как показал Паули, чтобы учесть это свойство электрона в теории Шредингера, нужно было удвоить число электронных состояний — учесть, что электрон может находиться в двух состояниях: со спином, направленным «вверх» и со спином, направленным «вниз». В теории Дирака существование магнитного момента электрона получалось непосредственно как следствие наличия у электрона электрического заряда и спина. Но число состояний при этом не удваивалось, а учетверялось! Кроме двух состояний с направлением спина «вверх» и «вниз» у электрона предсказывалось еще два точно таких же состояния: «спин вверх» и «спин вниз», но с отрицательной энергией. Возникла проблема состояний с отрицательной энергией.

Ох, и странные должны были быть свойства у этих состояний! Вот хотя бы такое: у этих состояний отри-