Физико-Математическое Наследие

В. А. Фок

Выдающийся советский физик-теоретик, академик АН СССР

Квантовая физика и строение материи

ФМН

Физика

Квантовая механика

URSS

Физико-математическое наследие: физика
(квантовая механика)

В. А. Фок

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА И СТРОЕНИЕ МАТЕРИИ

Издание второе,
исправленное

URSS
МОСКВА

ББК 22.314 22.3я44

Фок Владимир Александрович

Квантовая физика и строение материи. Изд. 2-е, испр.
М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — 72 с.
(Физико-математическое наследие: физика (квантовая механика).)

Книга посвящена изложению принципиальных основ квантовой механики. В ней рассказывается о том, каковы особенности эксперимента в области микрофизики и каким образом вводятся основные понятия квантовой механики. В заключение изложены основы математического аппарата квантовой механики.

Книга рассчитана на физиков, химиков, биологов и других ученых-естественников, а также философов.

Издательство «Книжный дом "ЛИБРОКОМ"».
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 9.
Формат 60×90/16. Печ. л. 4,5. Зак. № 2687.

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД».
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 11А, стр. 11.

ISBN 978-5-397-00580-7

НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА
E-mail: URSS@URSS.ru
Каталог изданий в Интернете:
http://URSS.ru
Тел./факс: 7 (499) 135-42-16
URSS Тел./факс: 7 (499) 135-42-46

4858 ID 51648

9 785397 005807

Содержание

1

Физика атомно-молекулярная и физика ядерная (малые и большие энергии)

Для понимания свойств вещества, вытекающих из его атомно-молекулярного строения, необходимо знание законов, определяющих свойства отдельных атомов и молекул. Атомы и молекулы представляют собой системы, составленные из тяжелых ядер с положительным зарядом и легких электронов, заряженных отрицательно. Строение атомов и молекул и взаимодействие их между собой и с излучением не может быть, однако, объяснено на основе законов классической физики. Самый факт устойчивости атомных систем и характер испускаемого ими света (спектральные линии) несовместим с классической механикой и электродинамикой и требует иных основ для своего объяснения. Эти новые основы были действительно найдены в 20-х и 30-х годах XX века. Законы, определяющие свойства атомов и молекул, сформулированы в виде стройной теории, которая носит название квантовой механики.

Квантовая механика хорошо объясняет явления в той области физики, которую можно характеризовать как область малых энергий. (Мы имеем в виду ту энергию, которая приходится во время реакций на одну частицу.) Примем за единицу энергии один электрон-вольт, т. е. энергию, приобретаемую электроном при пробеге разности потенциалов в 1 вольт в ускоряющем электрическом поле. Тогда характерная для атомно-молекулярной области энергия на одну частицу (например, энергия вырывания одного или нескольких электронов из атома) будет выражаться числом порядка от единицы до нескольких десятков или сотен. При таких энергиях можно рассматривать ядра атомов, а также электроны, как неизменные образования. Число входящих в систему частиц каждого сорта будет тогда постоянным.

Но в настоящее время изучаются также явления, в которых энергия реакции (в расчете на одну частицу) в миллионы или даже в миллиарды и в сотни миллиардов раз больше, чем в атомно-молекулярной области. Мы имеем в виду ядерную физику. При столь высоких энергиях в ходе реакций могут создаваться новые частицы, а также могут распадаться или превращаться в излучение такие частицы, которые при менее энергичных воздействиях могли считаться неизменными. Чтобы судить о порядке величины энергий, при которых могут создаваться новые частицы, можно выразить в электронвольтах энергию покоя

$$W_0 = m_0c^2$$

данной частицы; для электрона эта величина будет около полумиллиона, а для протона — около одного миллиарда электронвольт.

Таким образом, атомно-молекулярная область характеризуется малыми энергиями, а область ядерных реакций — большими энергиями.

Физика малых энергий имеет под собой, как мы уже говорили, прочную теоретическую основу — квантовую механику, принципы которой в настоящее время можно считать окончательно выясненными. Математический аппарат квантовой механики проверен на множестве конкретных приложений. Физика больших энергий требует, прежде всего, обобщения квантовой механики частиц на релятивистскую область и сближения ее с квантовой теорией поля, передающего взаимодействие между частицами. Это сделано до сих пор лишь отчасти, и, хотя в этой области получены многие важные результаты, квантовая теория поля и элементарных частиц далека от своего завершения. Даже принципы классификации элементарных частиц еще не вполне ясны. Физика больших энергий находится в настоящее время в состоянии бурного развития.

Говоря в этой работе о квантовой физике, мы будем иметь в виду главным образом физику малых энергий и ее теоретическую основу — нерелятивистскую квантовую механику. Уже эта ограниченная область содержит так много нового, не только в том, что касается фактов, но и в самой постановке задачи описания физических явлений, что понимание ее значительно расширяет круг наших привычных представлений и требует соответствующих философских обобщений.

2

Противоречия между свойствами атомных объектов и классической физикой

Заслуга новой постановки задачи описания явлений атомного масштаба принадлежит, прежде всего, великому датскому ученому Нильсу Бору; точка зрения, проводимая в настоящей работе, представляет результат критической разработки, развития и уточнения идей Бора.

Чтобы убедиться в необходимости новой постановки задачи, сопоставим явление дифракции электронов, в котором проявляются их волновые свойства, с давно известным фактом атомизма электрического заряда. Пучок электронов определенной энергии, прошедший сквозь кристалл и падающий на фотопластинку, дает дифракционную картину, которую нельзя объяснить иначе как на основе волновых представлений: картина эта соответствует наложению волн, рассеянных каждым атомом кристалла. При этом дифракционная картина не зависит от интенсивности пучка;

та же картина получается в предельном случае весьма слабых пучков, когда можно считать, что электроны падают на кристалл поодиночке. Таким образом, волновые свойства нужно приписать каждому электрону в отдельности, а не только совокупности электронов. Вместе с тем каждый электрон, попадая на фотопластинку, дает почернение только в одном месте (в одном зерне светочувствительного слоя), и лишь совокупность почерневших зерен дает распределение интенсивности прошедшего пучка (электронограмму). В настоящее время электронограммы широко используются при исследовании вещества.

Итак, электрон ведет себя в одних условиях (при прохождении сквозь кристалл) как протяженная волна, а в других (при попадании на зерно фотослоя) — как строго локализованная частица. На основе классических представлений такого различия в поведении электрона в разных условиях объяснить нельзя.

Рассмотрим другой пример. Атом водорода состоит, как известно, из тяжелого ядра (протона) с положительным зарядом и одного электрона. Этой системе из двух зарядов невозможно приписать, по классическим представлениям, такое состояние, которое обладало бы сферической симметрией. Между тем, мы знаем, что в основном состоянии (а также в некоторых других) атом водорода обладает сферической симметрией; это подтверждается поведением атома водорода при столкновении с другими частицами.

Этих простейших примеров уже достаточно, чтобы убедиться в том, что классическое описание неприменимо к микрообъектам, подобным электрону.

Здесь необходимо уточнить, что мы разумеем под классическим описанием и какие именно его черты делают его неприменимым к атомным объектам.

3

Абстракции, используемые классической физикой

Классическое описание физического процесса или явления характеризуется рядом абстракций, прежде всего предполагаемой независимостью явления от условий наблюдения. Единственное обстоятельство, связанное с условиями наблюдения и учитывавшееся также и в классической физике, есть выбор системы отсчета: по отношению к двум движущимся друг относительно друга системам отсчета одно и то же явление будет иметь различный вид, и это всегда учитывалось. Вопросу же о том, какими средствами производится наблюдение, принципиального значения не придавалось. Физический процесс рассматривался как нечто происходящее само по себе, а не как явление, конкретно познаваемое при помощи тех или иных средств наблюдения. Иначе говоря, явление рассматривалось не по отношению к прибору того или иного устройства, а, самое большее, по отношению к прибору, определенным образом движущемуся как целое (по отношению к определенной системе отсчета).

Такого рода абстракция, принятая в классической физике, может быть названа *абсолютизацией* понятия физического процесса.

Другой абстракцией является допускаемая в классической физике возможность неограниченно уточнять наблюдение и наблюдать разные стороны одного и того же процесса, не нарушая самого процесса. Эта абстракция тесно связана с предыдущей. В самом деле, если считать, что физический процесс не зависит от условий наблюдения, а имеет, в этом смысле, абсолютный характер, то естественно думать, что, варьируя условия наблюдения, можно проследить разные стороны одного и того же процесса. Комбинируя получаемые таким путем данные в единую картину (что признается возможным в классической физике), мы пришли бы к уточненному описанию физического процесса, к его *детализации*, которая может быть в принципе неограниченной. Ту же мысль о возможности неограниченной детализации физического процесса можно выразить другими словами. Можно сказать, что классическая физика допускала в принципе такую постановку опыта, в которой одновременно и сколь угодно детально были бы прослежены все стороны физического процесса.

Рассматривая происходящий в физической системе процесс как протекающую во времени смену состояний системы, классическая физика приходит к абсолютизации понятия состояния, причем этому понятию придается смысл некоей исчерпывающей характеристики системы: для системы с данными степенями свободы задание состояния означает задание мгновенных значений *всех* относящихся к системе величин. Вопрос о конкретных условиях измерения этих величин и о конкретных способах констатации того или иного состояния, а также о времени, потребном для такой констатации, в классической физике не ставился. Характеризуя состояние заданием ряда физических величин (или функций), соответствующих степеням свободы физической системы, классическая физика получала полное описание физического процесса, установив ход изменения этих величин или функций во времени.

Таким образом, основные абстракции, используемые классической физикой, сводятся к предположениям об абсолютном характере физических процессов (в смысле их независимости от условий наблюдения) и о возможности сколь угодно детального (а в пределе — исчерпывающе точного и всестороннего) их описания.

С этими предположениями связано понятие о лапласовском механическом детерминизме. Классическая механика и электродинамика представляют примеры теорий, которые позволяют определить состояние соответствующей (механической или электродинамической) системы в любой момент времени, коль скоро известно ее начальное состояние. Обобщая это положение на любые системы, можно было бы прийти к выводу, что все вообще процессы в природе однозначно предопределены. В такой крайней форме делаемый вывод граничит с фатализмом и представляется явно неприемлемым. Но в смягченной форме, в применении к ограниченным физическим системам, предположение об однозначной детерминированности процессов может считаться характерным для классической физики. Исключением являлась термодинамика, где приходилось вводить понятие о вероятности и о флуктуациях. Но там необходимость введения этих понятий оправдывалась сложностью рассматриваемых систем и невозможностью точно узнать их начальное состояние. Впрочем, несоответствие между термодинамикой, оперирующей с вероятностями, и детерминистской классической физикой ощущалось всегда, и попытки обоснования термодинамики на основе классической физики встречались с значительными трудностями.

4

Исторические корни принципов классической физики

Свойственные классической физике идеализации, о которых мы говорили выше, отнюдь не являются произвольными. Напротив, они совершенно естественно возникли в результате развития естествознания прошлых веков. В самом деле, еще в XIX веке не было способов изучать непосредственно поведение отдельных атомов, и самый факт существования атомов обосновывался путем косвенных умозаключений. Физика непосредственно имела дело с телами гораздо более крупного масштаба, по отношению к которым воздействие, связанное с измерением, играло совершенно ничтожную роль; в тех редких случаях, когда оно было заметным, его можно было учесть и внести на него поправки. При таком положении вещей казалось само собою разумеющимся представление об абсолютном характере физических процессов; это казалось настолько ясным, что даже не формулировалось особо. Лишь позднейшее развитие физики показало, что абсолютизация физических процессов не есть логическая необходимость, а представляет допущение, которое может и не оправдываться.

Аналогичный характер имеет и молчаливо принимаемое в классической физике допущение о возможности неограниченной детализации физического процесса в смысле всестороннего и подробного его описания. Такая возможность, по крайней мере в принципе, не вызывала сомнений.

Наконец, возникновение и распространение на всю физику лапласовского механического детерминизма также становится понятным в историческом аспекте. Здесь несомненно влияние колоссальных успехов механики, в частности небесной механики, в XVIII и XIX столетиях. Эти успехи отодвинули на второй план идеи и точки зрения, находившие применение в других областях науки, например в науках о живых организмах и о человеке (биология, социология, история), где допущение однозначной детерминированности событий явно непригодно.

Развитие электродинамики в конце XIX века не поколебало господствовавших в физике позиций однозначного детерминизма. Важным результатом этого развития явилось то, что электромагнитное поле стало рассматриваться как самостоятельная физическая реальность, наряду с материальными телами, на которые оно действует. Считая поле и тела единой физической системой, физика пришла к соответствующему обобщению понятия состояния системы. Поскольку это обобщение удовлетворяло условию, что состояние системы в последующие моменты времени однозначно определяется ее начальным состоянием, позиции однозначного детерминизма были сохранены.

Представление о том, что явления должны описываться по отношению к определенной системе отсчета, было с полной ясностью сформулировано еще Галилеем. Это представление уже содержит в себе элементы относительности к средствам наблюдения. Такая относительность учитывается здесь постольку, поскольку речь идет о движении регистрирующего прибора как целого, т. е. поскольку можно заменить понятие «средство наблюдения» понятием «система отсчета».

Тщательный анализ явления распространения света и световых сигналов, сделанный на основе представления об относительности к системе отсчета, привел Эйнштейна в 1905 году к его теории относительности. В этой теории, которую, впрочем, правильнее было бы называть «хроногеометрией» или теорией пространства и времени, содержится много новых понятий, но основные принципы классической физики, о которых мы говорили выше, ею не затрагиваются.

Таким образом, многовековое развитие физики, включая XIX век, привело к тому, что абсолютный характер физических процессов, возможность их неограниченной детализации и их однозначная детерминированность стали считаться основами физической науки. Эти принципы обычно не формулировались явно, но фактически они настолько укоренились в сознании ученых, что как бы признавались априорными основами науки и научной философии. Лишь открытие квантовой механики заставило критически проанализировать их. При этом обнаружилось, что к проблеме описания квантовых явлений они неприменимы. Тогда стало ясно, что указанные принципы отражают лишь определенный этап развития науки, но не являются априорными, раз навсегда установленными предпосылками описания явлений природы.

5

Неравенства Гейзенберга как граница применимости классического способа описания

Вернемся теперь к рассуждениям гл. 2. Мы рассмотрели там примеры (сферическая симметрия системы двух зарядов, интерференция электронных волн), показывающие, что классическое описание неприменимо к микрообъектам, подобным электрону. В то же время мы знаем, что к достаточно крупным (макроскопическим) объектам классическое описание применимо с очень большой точностью. Возникает вопрос: каковы границы применимости и пределы точности классического способа описания объектов, характеризуемого, как мы видели, полным отвлечением от условий наблюдения?

Рассмотрим простейшее явление — движение материальной точки массы m. По классической механике, состояние движения материальной точки для каждого момента времени определяется значениями ее координат x, y, z и составляющих количества движения p_x, p_y, p_z. Реальные возможности измерения положения и количества движения частицы лимитируются квантовыми эффектами. Эти квантовые эффекты проявляются, например, при взаимодействии частицы с фотонами света, облучающего частицу. Здесь существенно, что фотон, характеризуемый волновыми параметрами, является в то же время носителем определенной энергии и количества движения, т. е. носителем свойств частицы. Волновыми параметрами являются: частота ν, длина волны

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

и волновой вектор $\mathbf{k}$, дающий направление распространения, причем абсолютная величина его равна

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c}.$$

Если обозначить энергию и вектор количества движения фотона соответственно через E и $\mathbf{p}$, то связь между этими величинами и волновыми параметрами будет иметь вид

$$E = h\nu; \quad \mathbf{p} = \frac{h}{2\pi}\mathbf{k}, \tag{1}$$

где h — постоянная Планка, равная

$$h = 6{,}6 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}. \tag{2}$$

Если ввести угловую частоту $\omega = 2\pi\nu$ и новую постоянную

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}5 \cdot 10^{-27}\ \text{эрг} \cdot \text{с}, \qquad (2')$$

то соотношение (1) может быть написано в виде

$$E = \hbar\omega; \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \qquad (1')$$

Соотношение (1), или (1′), связывает волновые и корпускулярные свойства фотона: правые части его содержат величины ω и $\mathbf{k}$, определяемые из интерференционных явлений, а левые части — E и $\mathbf{p}$ — характеризуют фотон как частицу.

Рассматривая различные способы измерения положения и количества движения частицы, Гейзенберг пришел к следующему выводу. Положение частицы может быть, в принципе, измерено путем ее освещения, т. е. путем столкновения ее с фотонами. Но, поскольку фотоны являются носителями количества движения, они способны передавать его частице, вследствие чего количество движения частицы (даже если оно было предварительно измерено) становится в какой-то мере неопределенным. Условия, благоприятные для точного измерения положения частицы (малая длина волны), неблагоприятны для точного измерения ее количества движения (большая отдача при столкновении с фотоном), и наоборот, условия, благоприятные для измерения количества движения, неблагоприятны для измерения положения частицы. Количественно этот результат может быть выражен в виде неравенств

$$\Delta x \Delta p_x \geqslant \hbar; \ \Delta y \Delta p_y \geqslant \hbar; \ \Delta z \Delta p_z \geqslant \hbar, \tag{3}$$

где Δx, Δy, Δz означают неопределенности в координатах частицы, а Δp_x, Δp_y, Δp_z — неопределенности в ее количестве движения. Эти неравенства носят название неравенств Гейзенберга. К ним можно присоединить соотношение

$$\Delta t \Delta (E' - E) \geqslant \hbar, \tag{4}$$

связывающее неопределенность в изменении энергии частицы и неопределенность в моменте времени, когда это изменение произошло. Последнее неравенство можно назвать неравенством Гейзенберга—Бора.

Первоначально величины Δx, Δp_x и т.д. толковались как неточности измерения x, p_x и т.д. Такое толкование до известной степени верно, но оно недостаточно глубоко. Самый термин «неточность» как бы предполагает, что существуют и «точные» значения x, p_x, но только они почему-то не могут быть измерены. Это предположение уже явно неверно. На самом деле, невозможность точного измерения есть следствие того, что частица по своей природе не допускает одновременной локализации в координатном и импульсном пространствах; другими словами, эта невозможность есть следствие корпускулярно-волновой природы электрона. Поэтому лучше употреблять термин «неопределенность», а не «неточность».

Аналогичное значение имеет соотношение Гейзенберга—Бора (4). Оно утверждает, что акт переноса энергии не может быть точно локализован во времени. Отсюда уже как следствие получаются выводы, относящиеся к возможностям измерений (прежде всего к возможности измерить с данной точностью перенос энергии за заданное время).

Неравенства Гейзенберга дают ответ на вопрос, поставленный в начале этого параграфа: они указывают пределы применимости классического способа описания. Но они отнюдь не ставят каких-либо границ для более совершенных способов описания физических явлений и для более полного познания свойств физических объектов.

6

Постановка задачи описания физических явлений на основе понятия относительности к средствам наблюдения

В предыдущих параграфах мы неоднократно указывали, что классическое описание связано с рядом абстракций. В нем молчаливо предполагается независимость физических процессов от способов наблюдения, возможность наблюдать одновременно все стороны данного процесса и однозначная детерминированность хода любого процесса. Анализ типичных квантовых явлений, например тех, в которых проявляется корпускулярно-волновой дуализм электронов или фотонов, приводит к выводу, что эти предположения не оправдываются. Мы должны поэтому искать новую базу для описания явлений.

Основой нового способа описания явлений должен быть учет реальных возможностей измерений над микрообъектами. Мы должны учесть устройство и действие приборов, создающих условия, в которых находится объект. При этом приборы и внешние условия должны описываться классически, путем задания значений параметров, их характеризующих. Разумеется, эти параметры могут задаваться лишь с точностью, допускаемой неравенствами Гейзенберга; иначе мы выйдем за пределы реальных возможностей устройства приборов.

Необходимость усложнить описание атомных объектов, введя в рассмотрение средства наблюдения (приборы), вытекает из того, что здесь нельзя обойтись без посредника. Необходимым посредником при изучении атомных объектов и являются приборы; атомный объект может проявиться, только провзаимодействовав с прибором. Например, путь частицы становится видимым только в результате необратимого лавинного процесса в камере Вильсона или в слое фотопластинки. Вообще, когда мы говорим о поведении и свойствах атомных объектов, мы должны помнить, что эти свойства познаются не чисто умозрительным путем, а путем анализа результатов взаимодействия объекта с прибором, работающим в конкретных физических условиях и создающим эти условия. Ведь и акт познания не является чисто умозрительным, а опирается на наблюдения, имеющие материальный характер.

Чтобы учесть все это, необходимо взять в качестве основного элемента, составляющего предмет физической теории, результат взаимодействия атомного объекта с классически описываемым прибором. Из рассмотрения таких взаимодействий выводятся и свойства атомного объекта, а предсказания теории формулируются как ожидаемые результаты взаимодействий. Такая постановка задачи не исключает введения величин, характеризующих самый объект независимо от прибора (заряд, масса, спин частицы и т. п.), но в то же время позволяет изучать поведение объекта с той его стороны (например, корпускулярной или волновой), проявление которой обусловлено устройством прибора.

Новая постановка задачи позволяет, таким образом, рассматривать также и тот случай, когда разные стороны и разные свойства объекта не проявляются одновременно, т. е. когда невозможна детализация процесса, в котором объект участвует. Это будет так, если для проявления разных свойств объекта (например, способностей электрона к локализации и интерференции) требуются несовместные внешние условия. Можно сказать, по Бору, что свойства, проявляющиеся при взаимно исключающих условиях, дополняют друг друга. Рассматривать одновременное проявление дополнительных свойств не имеет смысла. Этим и объясняется отсутствие внутреннего противоречия в понятии «корпускулярно-волновой дуализм».

Положив в основу нового способа описания результаты взаимодействия микрообъекта с классическим прибором, мы отнюдь не приписываем объекту меньшей реальности, чем прибору, и не сводим свойства объекта к свойствам прибора. Мы только вводим понятие *относительности к средствам наблюдения,* обобщающее давно известное понятие относительности к системе отсчета.

7

Вероятность и потенциальная возможность

При данных внешних условиях результат взаимодействия объекта с прибором не является, вообще говоря, предопределенным однозначно, а обладает лишь некоторой вероятностью. Серия таких взаимодействий приводит к статистике, соответствующей определенному распределению вероятностей. Таким образом, в описание атомного объекта, его состояния и поведения вводится существенно новый элемент — понятие *вероятности,* а тем самым и понятие *потенциальной возможности.*

Введение на этой основе понятий вероятности и потенциальной возможности выводит физику из узких рамок лапласовского детерминизма, полностью сохраняя в то же время понятие причинности.

Понятие вероятности рассматривалось и в классической физике, но оно имело там другой смысл. В классической физике вероятности вводились тогда, когда условия задачи были не полностью известны и по неизвестным параметрам приходилось производить усреднение. При этом, однако, предполагалось, что в принципе усреднение необязательно и что всегда возможно такое доуточнение условий, которое бы позволило утверждать, что один из возможных результатов наступит с достоверностью, а другие не наступят совсем. Таким образом, в классической физике вероятности отражали неполноту формулировки задачи, неполноту, быть может, практически неизбежную, но в принципе устранимую.

Совсем другой характер имеют вероятности в квантовой физике. Там они необходимы по существу, и введение их отражает не неполноту условий, а объективно существующие при данных условиях потенциальные возможности.

8

Обобщение понятия состояния системы

Приняв за основу описания явлений акт взаимодействия объекта с прибором, мы значительно обогащаем наши средства описания и расширяем круг тех понятий, с которыми мы оперируем. Некоторые из новых понятий мы уже перечислили. Посмотрим, как должно быть обобщено понятие состояния системы и его изменения во времени.

Представим себе такой опыт над системой, который позволял бы делать прогнозы о результатах будущих взаимодействий системы с различного рода приборами. Такого рода начальный опыт должен включать в себя определенное приготовление системы (например, приготовление пучка электронов определенной энергии) и создание определенных внешних условий, в которых система будет находиться после приготовления (например, пропускание пучка электронов сквозь кристалл). Иногда целесообразно рассматривать приготовление и создание внешних условий как две различные стадии опыта, но можно рассматривать их и совместно как единый *начальный* опыт, цель которого — получение прогнозов. Таким образом, начальный опыт относится к *будущему*. Способ приготовления и внешние условия в начальном опыте должны описываться классически.

Начальный опыт дает только прогнозы, которые еще должны быть проверены. Проверка, состоящая в регистрации результатов взаимодействия системы с прибором того или иного типа, составляет заключительную стадию опыта. Ее можно рассматривать как отдельный *поверочный* опыт, результаты которого относятся уже к *прошлому* (а не к будущему, как начальный опыт). Поскольку устройство регистрирующего прибора в поверочном опыте может быть различным (и притом различные устройства будут, как правило, взаимно исключать друг друга), возможны различные варианты поверочного опыта; каждый из них приспособлен для измерения величин определенного типа (координаты, количество движения и т. п.).

Совокупность начального и поверочного опытов дает полный, или *завершенный*, опыт. Только такой завершенный опыт дает возможность узнать что-либо о свойствах изучаемого физического объекта.

Пусть начальный опыт воспроизводится много раз, причем условия его одни и те же. Это дает возможность многократного повторения поверочного опыта, состоящего в измерении определенной величины. При таком многократном повторении получается статистика для измеренных значений данной величины.

По этой статистике можно судить о распределении вероятностей для данной величины при условиях, характеризуемых начальным опытом. Отсюда видно, какую форму должен иметь прогноз, выводимый из начального опыта: он должен давать для каждой измеряемой в поверочном опыте величины соответствующее распределение вероятностей.

То обстоятельство, что начальный опыт должен давать распределения вероятностей также и для тех величин, измерения которых несовместны, еще раз показывает, что здесь речь идет о потенциальных возможностях, а не о значениях величин самих по себе (в отрыве от условий их измерения).

Совокупность потенциальных возможностей для поверочного опыта, вытекающих из данного начального опыта, можно рассматривать как характеристику состояния системы. Максимально полную характеристику можно назвать просто состоянием системы; начальный опыт, дающий такую характеристику, можно назвать максимально полным.

Такое определение состояния системы представляет естественное обобщение классического понятия состояния. Ведь и в классической физике задание состояния системы предполагает возможность проверки, причем, однако, результаты проверки предполагаются известными наперед, вследствие чего можно обойтись без понятия потенциальной возможности.

Если поверочный опыт производится через некоторое время после начального, то соответствующие вероятности должны быть пересчитаны. Такой пересчет вероятностей на более позднее время означает, согласно нашему определению, изменение состояния во времени. В предположении, что внешние условия для микрообъекта все время известны, теория должна давать закон изменения вероятностей во времени, иначе говоря, она должна давать закон изменения во времени состояния системы. К этому вопросу мы вернемся в гл. 13.

9

Назначение математического аппарата квантовой механики

Новая постановка задачи описания физических процессов, учитывающая относительность к средствам наблюдения, естественно, требует более сложного математического аппарата, чем прежняя, классическая постановка, в которой процессы описывались «сами по себе». Новый математический аппарат должен давать распределения вероятностей для разных величин, а не просто численные значения этих величин. Это, разумеется, его усложняет: там где в классической теории фигурировали числа (значения величин), в квантовой теории входят более сложные математические образования (операторы и связанные с ними понятия), позволяющие находить распределения вероятностей. При этом необходимо как-то характеризовать прибор, служащий для измерения; это можно сделать, указав набор тех величин, которые он способен измерять. Возможные значения измеряемых величин, непрерывных и дискретных, также должны получаться из математического аппарата (они получаются как спектр собственных значений соответствующих операторов). Вопрос о возможных значениях можно формально свести к вопросу о вероятностях: возможными будут те значения, для которых вероятности могут быть отличными от нуля.

Необходимо подчеркнуть, что математический аппарат квантовой механики отличается от математического аппарата классической механики не тем, что он более символичен, а тем, что его предмет иной: он оперирует не с числами, а с функциями, поскольку численному выражению подлежат не сами величины, а их вероятности. При этом вероятности должны вычисляться для определенных условий опыта, характеризуемых не просто указанием системы отсчета, а более полным и более сложным образом (внешними условиями и устройством прибора).

10

Основные этапы развития идей квантовой механики и ее математического аппарата

Исторический путь развития идей квантовой механики и ее математического аппарата был довольно сложным. Первыми этапами его были: открытие Планком его формулы для плотности черного излучения (1900) и ее истолкование Эйнштейном на основе понятия о фотонах (1905); формулировка Бором его постулатов о стационарных состояниях атомных систем и о частоте света, испускаемого системой при переходе из одного стационарного состояния в другое (1913); теория атома водорода; установление принципа соответствия Бора. Принцип соответствия Бора заключается в требовании, чтобы в пределе $h \to 0$ (точнее, в том случае, когда постоянная Планка h может считаться малой по сравнению с характерными для системы величинами, имеющими «размерность действия») непосредственно сравнимые с опытом формулы квантовой теории, например формулы для частот излучаемого света, переходили в соответствующие формулы классической теории.

На основе этих идей в период с 1916 по 1923 год была разработана «полуклассическая» механика, которая пыталась установить формальные «правила квантования», т. е. условия для нахождения стационарных состояний атомной системы. Эти условия состояли в указании тех величин («размерности действия»), которые должны быть «проквантованы», т. е. приравнены целому кратному постоянной Планка. Через эти величины выражались значения постоянных интегрирования (включая энергию), соответствующие стационарным состояниям. Частоты спектральных линий получались по правилу частот Бора.

Следует отметить, что «полуклассические» правила квантования были применимы лишь к простейшим механическим системам, а именно к тем, которые допускáли разделение переменных, соответствующих отдельным степеням свободы. Но главный недостаток «полуклассической» теории состоял в ее внутренней противоречивости: она использовала классические представления (например, непрерывность движения по траектории) наряду с квантовыми (скачкообразный переход из одного стационарного состояние в другое). Согласие полуклассической теории с опытом было весьма ограниченным: даже в тех немногих случаях, где она была применима, получаемые из теории уровни энергии часто оказывались неточными.

Исключением являлась теория атома водорода, дававшая весьма точные значения уровней. Коренным противоречием между теорией и опытом была неспособность теории объяснить наблюдаемую на опыте чрезвычайную устойчивость атомных систем. Эту коренную трудность старой теории удалось разрешить только на основе тех новых идей и той новой постановки задачи описания физических процессов, о которых мы говорили в предыдущих параграфах.

Но решение пришло не сразу. В период между 1923 и 1927 годами поиски решения велись по разным направлениям.

Один из путей имел исходной точкой принцип соответствия Бора. Гейзенберг рассмотрел классические ряды Фурье для дипольного момента излучающей атомной системы и, следуя Бору, привел в соответствие отдельным членам этих рядов квантовые переходы такой системы. Совокупности коэффициентов Фурье он сопоставил бесконечную матрицу, столбцы и строки которой соответствуют *стационарным состояниям* системы. Такого рода матрицы могут быть построены не только для дипольного момента, но и для других механических величин (координат, количества движения, энергии). Они подчиняются определенным алгебраическим соотношениям, которые позволяют их, в принципе, определить. Отсюда, в частности, получаются уровни энергии системы. Эта теория, предложенная Гейзенбергом в 1925 году, носит название матричной механики. Характерной особенностью теории Гейзенберга является сознательный отказ от наглядных представлений и стремление свести дело к правилам вычисления «непосредственно наблюдаемых» величин, в первую очередь частот и интенсивностей спектральных линий.

Как показало дальнейшее развитие, вычислительные правила матричной механики Гейзенберга верны и могут быть обоснованы другим путем. Но излишняя сложность матричной механики и трудность введения на ее основе новых физических понятий взамен классических заставляет предпочесть другие формы выражения квантовых законов.

Другой путь развития квантовой механики исходил из идей о волновом характере материи. Сюда относятся работы де Бройля (1924), впервые сопоставившего частице с данными количеством движения и энергией волну с определенным волновым вектором и частотой; между теми и другими величинами имеют место соотношения (1). Природа этой волны была де Бройлю неясна; он думал, что это есть некоторое «классическое» поле, подобное электромагнитному. Идея де Бройля о возможности сопоставить частице волну была развита Шрёдингером, который в 1926 году предложил рассматривать стационарные состояния атомной системы как собственные колебания некоторого поля. Задача определения уровней энергии атомной системы приводится к задаче на собственные значения некоторого линейного оператора (оператора энергии). Затем Шрёдингер обобщил свое уравнение колебаний на нестационарные состояния. Он рассмотрел также соотношение между матричной механикой Гейзенберга и своей теорией, и ему удалось доказать математическую эквивалентность между матрицами Гейзенберга и дифференциальными операторами. «Матричная механика» Гейзенберга и «волновая механика» Шрёдингера слились тогда в одну теорию — квантовую механику.

Таким путем был создан мощный математический аппарат, позволивший решать множество задач и допускающий дальнейшие обобщения. Из этих обобщений особенно важны те, которые дают формулировку свойств атомных систем, состоящих из одинаковых частиц (о чем мы будем говорить в гл. 14). Физическое толкование формального аппарата выработалось, однако, лишь постепенно. Первым шагом к нему было установление неравенств Гейзенберга и Бора. Этот первый шаг был сделан в 1927 году, а в следующие десятилетия, особенно после дискуссии между Эйнштейном и Бором, происходившей в 1935 году, стали выясняться и гносеологические аспекты квантовой механики.

В настоящей работе мы начали изложение именно с этих гносеологических аспектов. Поэтому, переходя к математическому аппарату, мы будем иметь возможность сразу же указывать физический смысл вводимых математических понятий. При этом мы не будем пытаться строить аппарат дедуктивным путем, исходя из физических принципов, а возьмем его готовым, в том виде, как он выработался в результате развития квантовой механики. Разумеется, мы должны будем ограничиться самым кратким объяснением основных понятий.

11

Волновая функция как выражение для потенциальных возможностей

Соотношения де Бройля (1′)

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}; \quad E = \hbar\omega \tag{5}$$

позволяют сопоставить частицу, обладающую количеством движения и энергией (5), с волной

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y + zp_z - Et)}. \tag{6}$$

Такое сопоставление было сделано де Бройлем в 1924 году. В то время физический смысл волновой функции ψ был неясен. С точки зрения, развиваемой в настоящей книге, мы должны рассматривать функцию ψ как описывающую потенциальные возможности взаимодействия частицы с приборами. В случае функции (6) эти потенциальные возможности таковы, что измерение количества движения должно дать значения (5), тогда как измерение координат может дать, с одинаковой вероятностью, все значения.

Запись этих потенциальных возможностей в виде волновой функции (6) есть весьма частный случай общего положения, принимаемого в квантовой механике. Согласно этому положению, *состояние системы характеризуется волновой функцией в том смысле, что через нее выражаются все распределения вероятностей для результатов измерения над системой.*

В случае одной частицы плотность вероятности для координат будет пропорциональна квадрату модуля волновой функции, выраженной через координаты. Плотность же вероятности для количества движения будет пропорциональна квадрату модуля амплитуды волновой функции, представленной в виде наложения плоских волн типа (6) (в виде суммы или интеграла).

Волновая функция (6) состоит из одного члена типа плоской волны, и этот член соответствует определенному значению количества движения (тому, которое входит в показатель). Это и выражает тот факт, что количество движения частицы в состоянии (6) является определенным, в том смысле, что его измерение с достоверностью даст именно данное значение. С другой стороны, квадрат модуля волновой функции (6) будет постоянным (не зависящим от координат); это соответствует полной неопределенности в значении координат частицы, т. е. равной вероятности получить, в результате их измерения соответствующим прибором, любые их значения.

Рассмотренный весьма частный пример волновой функции дает некоторое понятие об ее физическом смысле и для более общих случаев.

12

Операторы для физических величин

В квантовой механике устанавливается правило, позволяющее находить волновую функцию, описывающую то состояние системы, в котором данная физическая величина (или набор величин) имеет определенное значение. Для этого каждой физической величине сопоставляется свой оператор так, чтобы его собственные значения давали возможные значения этой величины; тогда его собственные функции будут описывать соответствующие состояния системы.

Так, например, операторы для составляющих количество движения имеют вид:

$$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}; \quad P_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \quad P_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{7}$$

Функция (6), описывающая то состояние частицы, в котором ее количество движения имеет значения p_x, p_y, p_z, удовлетворяет уравнениям

$$P_x\psi = p_x\psi; \quad P_y\psi = p_y\psi; \quad P_z\psi = p_z\psi, \tag{8}$$

т. е. она представляет собой собственную функцию операторов (7).

Дальнейший важный пример представляет предложенный Шрёдингером оператор энергии частицы массы m в поле с потенциальной энергией $U(x, y, z)$. Этот оператор составлен по образцу классической функции Гамильтона

$$H = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + U(x, y, z) \tag{9}$$

и имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U, \tag{10}$$

или, короче,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U, \tag{11}$$

где Δ — оператор Лапласа.

Применяя сформулированное выше общее правило к энергии системы, состоящей из одной частицы, приходим к уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \tag{12}$$

определяющему уровни энергии и стационарные состояния такой системы.

Для системы, состоящей из многих частиц (например, для многоэлектронного атома), оператор энергии также строится по образцу классической функции Гамильтона. Однако в этом случае необходимо учесть также свойства симметрии волновой функции относительно перестановок координат одинаковых частиц (электронов). (См. об этом гл. 14.)

По классическому образцу строятся также некоторые другие операторы, например операторы для орбитального момента количества движения электрона:

$$M_x = yP_z - zP_y; \quad M_y = zP_x - xP_z; \quad M_z = xP_y - yP_x. \tag{13}$$

Но общих правил составления операторов для физических величин указать нельзя. Надлежащий выбор операторов позволяет описывать и такие свойства атомных объектов, какие вообще не могут быть описаны на языке классической физики. К числу таких свойств относится неизвестная классической физике внутренняя степень свободы электрона, представляющая некоторую аналогию с собственным моментом количества движения и называемая спином. Эта степень свободы проявляется особенно заметно в поведении электронов в магнитном поле и в особого рода взаимодействии электронов между собой, выражаемом принципом Паули. К этому вопросу мы вернемся в гл. 14.

Сопоставление операторов физическим величинам позволяет выразить в математической форме требование, чтобы физические условия, необходимые для одновременного измерения двух величин, были совместны. Это требование означает возможность такого состояния, в котором обе эти величины имеют определенные значения; для этого необходимо, чтобы существовала общая собственная функция соответствующих операторов. Последнее условие будет во всяком случае выполняться, если результат применения этих двух операторов к любой функции не будет зависеть от их порядка (т. е. если оба оператора коммутируют). Если же, наоборот, независимость от порядка применения операторов не имеет места ни для какой функции, то это значит, что условия для измерения той и другой величины друг друга исключают.

В качестве примера рассмотрим операторы для одноименных составляющих радиус-вектора и количества движения частицы. Имеем:

$$(xP_x - P_x x)\psi = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right) = i\hbar\psi$$

для любой функции ψ. Иначе говоря,

$$xP_x - P_x x = i\hbar. \tag{14}$$

Следовательно, данные операторы не коммутируют, и условия для точного измерения координаты и количества движения несовместны, как это и должно быть в силу неравенств Гейзенберга. Можно показать, что неравенства Гейзенберга вытекают из соотношений вида (14) и из выражения для вероятностей через волновую функцию.

Таким образом, описание состояния системы посредством волновой функции автоматически учитывает возможности измерения.

13

Зависимость волновой функции от времени

Волновая функция де Бройля (6) зависит от времени через посредство множителя $\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Et\right\}$, где E — энергия частицы. (Де Бройль рассматривал релятивистскую частицу, в энергию которой включена энергия покоя m_0c^2, но под E можно подразумевать и нерелятивистскую энергию.) Если предположить такую же зависимость от времени у волновой функции, удовлетворяющей уравнению Шрёдингера (12), то можно будет исключить из этого уравнения параметр E. В самом деле, положим

$$\psi(x,y,z,t) = \psi_E(x,y,z,t)\ \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Et\right\} \tag{15}$$

и подчиним ψ уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{16}$$

Тогда ψ_E (а также ψ) будет удовлетворять уравнению Шрёдингера (12).

Решение вида (15) соответствует стационарному состоянию системы. В самом деле, распределение вероятностей для координат, которое выражается через квадрат модуля ψ, от времени не зависит. Так же точно не будут зависеть от времени распределения вероятностей для количества движения и для других величин, операторы которых не зависят от времени явно. Такое состояние вполне отвечает представлению о стационарности.

Но уравнение (16) является более общим, чем уравнение (12). Его можно толковать как закон изменения состояния данной системы во времени. Состояния с определенной энергией являются стационарными. Но возможны и такие состояния, в которых энергия не имеет определенного значения; такие состояния стационарными уже не будут.

Уравнению (16) будет удовлетворять не только функция (15), но также и сумма выражений вида (15), взятая для разных значений E (а в пределе также интеграл по E). Для такого решения распределение вероятностей для координат (а также для других величин, в том числе при $U \neq 0$, и для количества движения) будет меняться со временем. Что же отображает в этом случае зависимость волновой функции ψ от времени?

Как мы уже указывали в конце гл. 8, вероятности результатов поверочного опыта могут зависеть от времени, к которому этот опыт относится, и теория должна давать эту зависимость. Иначе говоря, теория должна давать *прогнозы,* относящиеся к определенному времени. (Разумеется, прогнозы возможны только в том случае, если система находится в *заданных* внешних условиях.) Зависимость волновой функции от времени и дает возможность делать такие прогнозы.

Если зависимость волновой функции от времени сводится к показательному множителю $\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Et\right\}$, то, как мы видели, все распределения вероятностей, а значит и прогнозы, от времени не зависят, и мы имеем стационарное состояние. Рассмотрим теперь пример *нестационарного* состояния свободной частицы.

Возьмем для простоты одномерную задачу. Пусть в начальный момент времени распределения вероятностей для координаты x и для количества движения $p_x = p$ соответствуют наибольшей возможной определенности этих величин, совместной с неравенством Гейзенберга. Можно показать, что эти распределения будут выражаться законом Гаусса. А именно, если среднее значение координаты есть x_0 и среднее значение количества движения есть p_0, причем средние квадратичные отклонения для этих величин суть $(\Delta x)_0$ и $(\Delta p)_0$, то в случае наибольшей возможной определенности[1]

$$(\Delta x)_0\,(\Delta p)_0 = \frac{\hbar}{2}, \tag{17}$$

[1] Множитель 1/2 в правой части (17) не означает нарушения неравенств Гейзенберга, так как эти неравенства указывают только порядок входящих в них величин, и неопределенностям Δx и Δp не давалось точного определения; в формуле же (17)

а плотности вероятностей будут

$$w(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta x)_0} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2(\Delta x)_0^2}\right\}, \qquad (18)$$

$$w^*(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta p)_0} \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{2(\Delta p)_0^2}\right\}, \qquad (19)$$

где $(\Delta x)_0$ и $(\Delta p)_0$ связаны соотношением (17). Этим распределениям вероятности соответствует волновая функция

$$\psi(x,0) = \sqrt{w(x,0)} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} x p_0\right\} \qquad (20)$$

и ее преобразованная по Фурье

$$\varphi(p,0) = \sqrt{w^*(p,0)} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} x_0 (p-p_0)\right\}. \qquad (21)$$

Каковы же будут прогнозы результатов измерения, если оно будет производиться через время t после начального момента? Мы можем угадать ответ, не пользуясь аппаратом квантовой механики, и затем сравнить его с ответом, вытекающим из теории.

Прежде всего, поскольку в классической механике количество движения свободной частицы сохраняется, мы можем ожидать, что в квантовой механике будет сохраняться распределение вероятностей для него. Та-

---

под Δx и Δp подразумеваются именно средние квадратичные, и эта формула дает для них точный нижний предел.

ким образом, мы должны ожидать, что для времени t

$$w^*(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta p} \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{2(\Delta p)^2}\right\}, \tag{22}$$

причем

$$\Delta p = (\Delta p)_0. \tag{23}$$

Что касается координаты, то мы должны ожидать, что ее среднее значение к моменту времени t будет уже не x_0, а

$$x_t = x_0 + \frac{p_0}{m}t, \tag{24}$$

поскольку частица движется (если ее рассматривать классически) со скоростью $v = \frac{p_0}{m}$.

Неопределенность же в координате должна с течением времени возрастать вследствие неопределенности $\frac{\Delta p}{m}$ в скорости частицы. Считая, что Δx складывается из начальной неопределенности $(\Delta x)_0$ и из неопределенности $\frac{\Delta p}{m}t$, накопившейся за время t, по закону сложения независимых погрешностей будем иметь

$$\Delta x = \sqrt{(\Delta x)_0^2 + \left(\frac{\Delta p}{m}t\right)^2}. \tag{25}$$

Таким образом, из чисто классических рассуждений мы получили, что прогнозы результатов измерения координаты во время t должны соответствовать распределению вероятностей с плотностью

$$w(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x} \exp\left\{-\frac{(x - x_t)^2}{2\,(\Delta x)^2}\right\}, \qquad (26)$$

где x_t определяется из (24), Δx — из (25); обе эти величины зависят от времени.

Те же формулы (26) и (22) получаются и по квантовой механике, если мы будем решать уравнение Шрёдингера для свободной частицы при начальном значении (20) волновой функции[2)].

Приведенные выше «классические» рассуждения, разумеется, не являются выводом и не могут заменить решения уравнения Шрёдингера. Но они дают наглядную иллюстрацию к квантово-механическим формулам. Прежде всего они подтверждают правильность толкования волновой функции как выражения для потенциальных возможностей результатов измерения. Становится ясным, что зависимость волновой функции (и соответствующих вероятностей) от времени относится к *прогнозам* и не может быть истолкована как изменение частицы самой по себе (в классическом смысле). В самом деле, поскольку частица свободна и устойчива (как это предполагается), никаких изменений, подобных расплыванию, с ней происходить не может.

[2)] Фаза функции $\varphi(p,t)$ будет линейной функцией от времени, фаза же $\psi(x,t)$ будет иметь более сложный вид.

В начальный период развития квантовой механики «расплывание» волновой функции свободной частицы производило впечатление парадокса. Само понятие нестационарности состояния свободной и устойчивой частицы казалось противоречивым. Теперь же мы можем видеть в возможности таких состояний только лишнее подтверждение правильности отказа от абсолютизации физических процессов.

Резюмируя, можно сказать, что волновая функция позволяет, на основании данных, полученных в *начальном* опыте, делать прогнозы, относящиеся к *поверочному* опыту. Изменение волновой функции во времени по уравнению Шрёдингера отображает изменение этих прогнозов и имеет поэтому физический смысл только вплоть до момента поверочного опыта. В поверочном опыте потенциальные возможности различных результатов измерения превращаются в действительность, а новые потенциальные возможности открываются только в том случае, если этот опыт может быть использован в качестве начального (что, вообще говоря, не имеет места; так, квант света, поглощенный атомом, перестает существовать). Если этот (или новый) опыт дает новые начальные данные, то по ним можно построить новую волновую функцию для новых прогнозов. Эта новая волновая функция никак не связана со старой, и переход от старой функции к новой происходит не по уравнению Шрёдингера; он отображает не физический процесс, а процесс логический: переход от старых начальных данных к новым. Правда, этот логический процесс связан с актом измерения, который является процессом физическим. Но акт измерения должен описываться классически, тогда как волновая функция отображает не самый акт измерения, а лишь его результаты и выводимые из них прогнозы.

14

Многоэлектронная задача квантовой механики

Многоэлектронные системы (атомы, молекулы) представляют пример физических объектов, для описания которых классические понятия становятся явно непригодными. Такие фундаментальные свойства многоэлектронных атомов, как их устойчивость или их химические свойства, характеризуемые периодической системой элементов Менделеева, противоречат законам классической физики и требуют для своего объяснения новых понятий. Квантовая механика дает для этого надлежащие средства.

Помимо общих законов квантовой механики, для описания многоэлектронных систем необходимо, во-первых, уточнение свойств отдельного электрона (введение новой степени свободы — так называемого спина) и, во-вторых, формулировка особого рода несилового взаимодействия между одинаковыми частицами (принцип Паули). Уточненные таким образом законы квантовой механики дают, например, возможность объяснить тот факт, что химические свойства некоторых атомов с разным числом электронов оказываются аналогичными. (Выражением этого факта является периодическая система элементов Менделеева.) Вообще, по заданному заряду атомного ядра и заданному числу электронов оказывается возможным предвычислить многие свойства атомов, в том числе их оптические спектры.

Новая степень свободы электрона — его спин — может быть сопоставлена с его моментом количества движения. Как мы видели в гл. 12, для орбитального момента количества движения в квантовой механике вводятся операторы M_x, M_y, M_z, выражающиеся по классическому образцу через операторы для координат и для количества движения по формулам (13):

$$M_x = yP_z - zP_y,$$
$$M_y = zP_x - xP_z,$$
$$M_z = xP_y - yP_x.$$

Эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} M_yM_z - M_zM_y &= i\hbar M_x, \\ M_zM_x - M_xM_z &= i\hbar M_y, \\ M_xM_y - M_yM_x &= i\hbar M_z. \end{aligned} \tag{27}$$

В соотношениях (27) можно видеть общие свойства всякого момента количества движения, а не только орбитального момента одной частицы. Так, легко проверить, что если соотношениям (27) удовлетворяют

ERROR: timeout
OFFENDING COMMAND: timeout

коммутирующие между собой векторные операторы

$$\mathbf{M}^{(1)} = \left(M_x^{(1)}, M_y^{(1)}, M_z^{(1)}\right) \quad \text{и} \quad \mathbf{M}^{(2)} = \left(M_x^{(2)}, M_y^{(2)}, M_z^{(2)}\right),$$

то им удовлетворяет и сумма

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{(1)} + \mathbf{M}^{(2)}.$$

Каждый из операторов M_x, M_y, M_z удовлетворяющих соотношениям (27), коммутирует с оператором

$$\mathbf{M}^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 \tag{28}$$

для квадрата момента количества движения. Поэтому, исследуя операторы M_x, M_y, M_z, можно сперва задаться определенным собственным значением оператора $\mathbf{M}^2$.

Исходя из соотношений (27) (и не пользуясь (13)), можно показать, что собственные значения $\mathbf{M}^2$ равны $\hbar^2 s(s+1)$, где s есть либо целое, либо полуцелое неотрицательное число:

$$\text{соб. зн. } \mathbf{M}^2 = \hbar^2 s(s+1). \tag{29}$$

Согласно Паули и Дираку, момент количества движения электрона слагается из двух частей:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_{\text{орб}} + \mathbf{M}_{\text{соб}}, \tag{30}$$

где $\mathbf{M}_{\text{орб}}$ обозначает орбитальный и $\mathbf{M}_{\text{соб}}$ — собственный моменты количества движения. Составляющие каждого из этих векторных операторов удовлетворяют соотношениям (27). Квадрат орбитального момента может принимать значения

$$\hbar^2 l(l+1),$$

где $l = 0, 1, 2, \ldots$, что соответствует формуле (29) для целочисленного s. Квадрат собственного момента электрона принимает только одно значение, определяемое из (29) при

$$s = \frac{1}{2}.$$

Это число s называется спином электрона. (Существуют и частицы с другим спином, но мы здесь рассматриваем только электроны, для которых $s = 1/2$.)

Операторы для собственного момента количества движения электрона удобно писать в виде:

$$\begin{aligned} (M_x)_{\text{соб}} &= \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \\ (M_y)_{\text{соб}} &= \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \\ (M_z)_{\text{соб}} &= \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \end{aligned} \tag{31}$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — новые операторы. Поскольку спин электрона (число s в формуле (29)) равен $1/2$, можно показать, что собственные значения каждого из спиновых операторов $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ равны ± 1 и, следовательно,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \tag{32}$$

Но тогда перестановочные соотношения (27) дают:

$$\begin{aligned}
\sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x,\\
\sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y,\\
\sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z.
\end{aligned} \tag{33}$$

Спиновые операторы могут быть представлены в виде двухрядных матриц (матрицы Паули), сообразно чему волновая функция электрона должна быть двухкомпонентной. Двухкомпонентную волновую функцию удобно писать в виде

$$\psi = \psi(\mathbf{r}, \sigma); \quad \sigma = \pm 1, \tag{34}$$

где $\mathbf{r} = (x, y, z)$ — радиус-вектор электрона. Тогда результат применения спиновых операторов к волновой функции может быть представлен в форме

$$\begin{aligned}
\sigma_x\psi(\mathbf{r}, \sigma) &= \psi(\mathbf{r}, -\sigma),\\
\sigma_y\psi(\mathbf{r}, \sigma) &= -i\sigma\psi(\mathbf{r}, -\sigma),\\
\sigma_z\psi(\mathbf{r}, \sigma) &= \sigma\psi(\mathbf{r}, -\sigma),
\end{aligned} \tag{35}$$

легко допускающей обобщение на случай многих электронов.

Введение спиновой переменной σ означает введение новой степени свободы электрона, неизвестной классической физике. Этот шаг представляет чрезвычайно существенное уточнение свойств электрона. Наличие спина сказывается уже в задаче одного тела:

оно приводит к удвоению уровней энергии электрона в магнитном поле. Но решающее значение приобретает новая степень свободы в задаче многих тел. В связи с принципом Паули, приводящим к новому виду взаимодействия между одинаковыми частицами (например, электронами), спиновая степень свободы электрона является основой квантово-механического описания многоэлектронных систем (электронов в атомах, молекулах, кристаллах и т. п.), многие характерные свойства которых не могут быть объяснены без ее учета.

Обобщая формулу (34), можно написать волновую функцию системы из n электронов в виде

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; \ldots; \mathbf{r}_n, \sigma_n), \tag{36}$$

где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n$ — радиус-векторы, а $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ — спиновые переменные электронов (каждая из спиновых переменных принимает значения $\sigma = \pm 1$). Согласно принципу Паули, необходимым дополнительным условием, налагаемым на волновую функцию, является ее антисимметрия относительно перестановок электронов. Это значит, что при перестановке любой пары аргументов $(\mathbf{r}, \sigma)$ функция ψ должна менять знак, например

$$\psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_3, \sigma_3; \ldots; \mathbf{r}_n, \sigma_n) = \\ = -\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_3, \sigma_3; \ldots; \mathbf{r}_n, \sigma_n). \tag{37}$$

Функции (36) могут быть выражены через множители, зависящие только от спиновых переменных ($\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$), и через функции, зависящие только от координат. Эти последние выражаются через одну функцию, свойства симметрии которой зависят от значения результирующего спинового момента количества движения системы электронов.

Спины отдельных электронов могут складываться, а могут и компенсировать друг друга. Так, результирующий спин системы из двух электронов может принимать значения $s = 0$ (спины компенсированы) и $s = 1$ (спины складываются). Координатная волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ такой системы симметрична в случае $s = 0$, $\big(\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\big)$ и антисимметрична в случае $s = 1$, $\big(\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\big)$. Спин системы из n электронов может принимать значения $s = 0, 1, \ldots, \frac{n}{2}$, если n — число четное, и значения $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, \frac{n}{2}$, если n — нечетное. Свойства симметрии координатной волновой функции системы n электронов с заданным спином установлены для общего случая в 1940 году автором этой работы, и мы их здесь выписывать не будем.

Как уже говорилось в гл. 12, оператор энергии системы электронов строится по образцу классической функции Гамильтона. Этот оператор энергии симметричен относительно всех перестановок координат электронов. Спиновых переменных оператор энергии не содержит; тем не менее, уровни энергии системы n электронов существенно зависят от их результирующего спина. Это странное на первый взгляд обстоятельство весьма просто разъясняется тем, что от результирующего спина зависят дополнительные условия, налагаемые на собственные функции оператора энергии, а именно их свойства симметрии.

Как мы уже не раз упоминали, спин электрона и принцип Паули являются основой теории многоэлектронных систем. На этих понятиях, недоступных классической формулировке, основана вся квантовая химия, и в частности теория химической связи.

Вообще же число приложений квантовой физики к вопросам строения материи столь велико, что в настоящей работе нет возможности их даже перечислить. Хотелось бы только отметить, что в этих приложениях речь идет не о внесении малых поправок в классическую теорию, а о выявлении не поддающихся классическому объяснению фундаментальных свойств материи, притом не только тех, какие требуют для своего обнаружения тонких опытов, но и таких, какие проявляются «весомо, грубо, зримо».

Другие книги нашего издательства:

URSS

Серия «Синергетика: от прошлого к будущему»

Пенроуз Р. НОВЫЙ УМ КОРОЛЯ. О компьютерах, мышлении и законах физики. Пер. с англ.
Майнцер К. Сложносистемное мышление: Материя, разум, человечество. Новый синтез. Пер. с англ.
Хакен Г. Информация и самоорганизация. Пер. с англ.
Малинецкий Г. Г. Математические основы синергетики.
Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б. Нелинейная динамика и хаос: основные понятия.
Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б., Подлазов А. В. Нелинейная динамика.
Малинецкий Г. Г. (ред.) Будущее России в зеркале синергетики.
Малинецкий Г. Г. (ред.) Синергетика: Исследования и технологии.
Климонтович Ю. Л. Турбулентное движение и структура хаоса.
Трубецков Д. И. Введение в синергетику. В 2 кн.: Колебания и волны; Хаос и структуры.
Арнольд В. И. Теория катастроф.
Быков В. И. Моделирование критических явлений в химической кинетике.
Безручко Б. П. и др. Путь в синергетику. Экскурс в десяти лекциях.
Данилов Ю. А. Лекции по нелинейной динамике. Элементарное введение.
Князева Е. Н., Курдюмов С. П. Основания синергетики. Кн. 1, 2.
Анищенко В. С. Знакомство с нелинейной динамикой.
Анищенко В. С. Сложные колебания в простых системах.
Олемской А. И. Синергетика сложных систем: Феноменология и статистическая теория.
Редько В. Г. Эволюция, нейронные сети, интеллект.
Белецкий В. В. Очерки о движении космических тел.
Тюкин И. Ю., Терехов В. А. Адаптация в нелинейных динамических системах.
Чернавский Д. С. Синергетика и информация (динамическая теория информации).
Баранцев Р. Г. Синергетика в современном естествознании.
Баранцев Р. Г. и др. Асимптотическая математика и синергетика.
Пригожин И., Стенгерс И. Время. Хаос. Квант. К решению парадокса времени.
Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой.
Пригожин И., Николис Г. Познание сложного. Введение.
Пригожин И., Гленсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций.
Суздалев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов.

Тел./факс:
(499) 135-42-46,
(499) 135-42-16,
E-mail:
URSS@URSS.ru
http://URSS.ru

Наши книги можно приобрести в магазинах:

«Библио-Глобус» (м. Лубянка, ул. Мясницкая, 6. Тел. (495) 625-2457)
«Московский дом книги» (м. Арбатская, ул. Новый Арбат, 8. Тел. (495) 203-8242)
«Молодая гвардия» (м. Полянка, ул. Б. Полянка, 28. Тел. (495) 238-5001, 780-3370)
«Дом научно-технической книги» (Ленинский пр-т, 40. Тел. (495) 137-6019)
«Дом книги на Ладожской» (м. Бауманская, ул. Ладожская, 8, стр. 1. Тел. 267-0302)
«Гнозис» (м. Университет, 1 гум. корпус МГУ, комн. 141. Тел. (495) 939-4713)
«У Кентавра» (РГГУ) (м. Новослободская, ул. Чаянова, 15. Тел. (499) 973-4301)
«СПб. дом книги» (Невский пр., 28. Тел. (812) 448-2355)

Владимир Александрович ФОК
(1898–1974)

Выдающийся отечественный ученый, классик теоретической физики XX века. Академик АН СССР. Родился в Петербурге. В 1922 г. окончил Петроградский университет. В разные годы работал в Государственном оптическом институте, в Физическом институте АН СССР, в Институте физических проблем АН СССР. С 1932 г. профессор Ленинградского государственного университета и член-корреспондент АН СССР, с 1939 г. — академик. Член ряда академий наук и научных обществ. Удостоен многих национальных и международных наград. Лауреат Государственной премии СССР (1946) и Ленинской премии (1960).

Основные научные достижения В. А. Фока получены в области квантовой механики, квантовой теории поля, теории многоэлектронных систем, статистической физики, распространения радиоволн, теории дифракции, математической физики, теории гравитации, теории относительности и др. В 1926 г. он дал скалярное релятивистское обобщение уравнения Шредингера (получившее название уравнения Клейна—Гордона—Фока); в 1927 г. решил задачу о тепловом пробое диэлектриков; в 1930 г. рассмотрел уравнение самосогласованного поля в квантовой теории многоэлектронных систем с учетом принципа Паули и разработал приближенный метод его описания и расчета (метод Хартри—Фока). Ему принадлежит вывод приближенных уравнений движения системы тел в рамках теории тяготения А. Эйнштейна. Выполнен ряд фундаментальных исследований по теории распространения радиоволн и по методологическим вопросам квантовой механики и теории относительности. Среди его работ: «Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн» (2-е изд. URSS, 2007), «Работы по квантовой теории поля» (2-е изд. URSS, 2007), «Теория пространства, времени и тяготения» (3-е изд. URSS, 2007), «Начала квантовой механики» (5-е изд. URSS, 2008), «Теория Эйнштейна и физическая относительность» (2-е изд. URSS, 2010).

4858 ID 51648

9 785397 005807

НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТ

Тел./факс: 7 (499) 135–42–1
Тел./факс: 7 (499) 135–42–46

URSS http://URSS.ru

Любые отзывы о настоящем издании, а также обнаруженные опечатки присылайте по адресу **URSS@URSS.ru**. Ваши замечания и предложения будут учтены и отражены на web-странице этой книги в нашем интернет-магазине **http://URSS.ru**